

César Manchein

*Duas partículas clássicas confinadas num  
bilhar unidimensional e interagindo via  
potencial de Yukawa*

Dissertação apresentada como requisito parcial à  
obtenção do grau de Mestre em Física. Programa  
de Pós-Graduação em Física, Setor de Ciências  
Exatas.

Orientador: Prof. Dr. Marcus Werner Beims.

CURITIBA

2006

*Dedico esta dissertação a meus pais,  
cujo exemplo de honestidade e trabalho  
tem sido um norteador para a minha vida,  
e a minha noiva, que tem  
me dado apoio nos momentos mais difíceis  
e mostrado a simplicidade de ter esperança.*

# *Agradecimentos*

Agradeço a todos que de alguma forma ajudaram-me a alcançar o objetivo de obter o grau de Mestre em Física. Chego ao final deste Curso de Pós-graduação, convicto que sem a AJUDA, APOIO, e FORÇA que recebi de quem menciono abaixo, talvez não tivesse atingido esta meta.

Agradeço,

- a meus pais e minha irmã: Valdino, Ana e Vanessa Manchein, pelo incentivo e força que sempre me deram;
- à minha noiva: Denise Sevegnani, que esteve ao meu lado em todos os momentos, apoiando-me e dando-me forças para continuar;
- ao meu orientador e amigo: Prof. Marcus W. Beims, pelo tempo e esforço que me dedicou durante estes dezessete meses em que trabalhamos juntos;
- ao amigo Prof. Luciano C. Martins, que teve grande participação em minha formação acadêmica (iniciação científica);
- aos colegas de Pós-Graduação, que de alguma forma colaboraram no desenvolvimento deste trabalho. Em especial, Paulo C. Rech, Jiusandro Kühn, Jane Rosa, Alexandre Mikowski, Paulo C. Soares, Geraldo T. Kubo e aos amigos do DINE (Laboratório de Dispositivos Nano-estruturados);
- à CAPES, pelo suporte financeiro;
- à cidade e ao povo de Curitiba.

*“O cientista não estuda a natureza porque ela é útil;  
estuda-a porque se delicia com ela, e se delicia  
com ela porque ela é bela. Se a natureza não  
fosse bela, não valeria a pena conhecê-la,  
se não valesse a pena conhecê-la,  
não valeria a pena viver.”*

***Henri Poincaré***



# *Resumo*

O problema de partículas interagentes em bilhares com diferentes geometrias (unidimensionais, poligonais, etc.), é bastante amplo e interessante do ponto de vista físico. Normalmente são sistemas bastante simples cuja dinâmica pode variar de regular, quasi-regular para caótica. Neste trabalho estudamos a dinâmica clássica de duas partículas interagindo via potencial de Yukawa, com massas diferentes, aprisionadas em um bilhar unidimensional. Sabe-se que uma dinâmica regular pode ser obtida em colisões de partículas rígidas para valores de razões de massas  $\gamma = m_2/m_1$  específicos, e que os expoentes de Lyapunov são iguais a zero. Quando consideramos a interação entre as partículas via o potencial de Yukawa, o expoente de Lyapunov máximo torna-se positivo e varia com a razão das massas das partículas. Apresentamos a distribuição desses expoentes para várias condições iniciais e determinadas razões de massas, que revelam detalhes sobre a dinâmica do espaço de fases. Mostramos que o número de ocorrências de expoente de Lyapunov de maior probabilidade, extraído da distribuição dos expoentes de Lyapunov máximos, é sensível à existência de trajetórias aprisionadas no espaço de fases. Em particular, a influência da dinâmica integrável e pseudo-integrável, obtida para certos valores  $\gamma$  e para o caso de colisões rígidas pode ser claramente identificada e demonstra a sensibilidade do expoente de Lyapunov mais provável.

# Abstract

*The problem of interacting particles in billiards with different geometries (one-dimensional, polygonal, ...) is a extensive and interesting in Physics. These billiards are usually very simple, but its dynamics may change from regular, quasi-regular to chaotic. Here we study the classical dynamics of two unequal-mass particles in a one-dimensional billiard interacting Yukawa potential. It is known that regularity may be obtained in point-like collisions for specific mass ratios  $\gamma = m_2/m_1$ , and that Lyapunov exponents are zero. However, if the Yukawa interaction is introduced, positive Lyapunov exponents are found and change with the masses ratio between particles. While the largest finite-time Lyapunov exponent changes smoothly with  $\gamma$ , the most probable one, extracted from the distribution of finite-time Lyapunov exponents over initial conditions, reveals details about the phase space dynamics. In particular, the influence of the integrable and pseudointegrable dynamics found for specific mass ratios in the point-like collisions can be clearly identified and demonstrates the sensitivity of the most probable Lyapunov exponent.*

# *Sumário*

<b>Agradecimentos</b>	<b>ii</b>
<b>Resumo</b>	<b>iv</b>
<b>Abstract</b>	<b>v</b>
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
<b>2 Fundamentação Teórica</b>	<b>5</b>
2.1 Sistemas Dinâmicos e sua Caracterização . . . . .	5
2.1.1 Sistemas Dinâmicos . . . . .	5
2.1.2 Sistemas Conservativos . . . . .	7
2.1.3 Sistemas Hamiltonianos Integráveis . . . . .	9
2.1.4 Toros Invariantes . . . . .	12
2.1.5 Toros Instáveis . . . . .	13
2.2 Conceitos de Caos Clássico . . . . .	17
2.2.1 Seções de Poincaré . . . . .	17
2.2.2 Expoentes de Lyapunov . . . . .	18
2.2.3 Cálculo do Expoente de Lyapunov Máximo . . . . .	20
2.2.4 Sistemas Dinâmicos Ergódicos e Mesclados (“ <i>mixing</i> ”) . . . . .	21
2.2.5 Armadilhas Dinâmicas . . . . .	22
<b>3 Extensão do Algoritmo de Benettin</b>	<b>27</b>
3.1 Expoentes de Lyapunov . . . . .	27
3.2 Extensão do Algoritmo . . . . .	29

3.3	Distribuição dos expoentes de Lyapunov a tempo-finito . . . . .	31
<b>4</b>	<b>Dinâmica de Partículas Aprisionadas em Bilhares</b>	<b>33</b>
4.1	Sistemas Pseudo-integráveis . . . . .	33
4.1.1	Construção de Superfícies Invariantes Clássicas . . . . .	34
4.2	Bilhares e Aplicações . . . . .	38
4.3	Partículas Interagentes num Bilhar 1D . . . . .	44
<b>5</b>	<b>Resultados e Discussões</b>	<b>47</b>
5.1	Resultados Analíticos . . . . .	47
5.1.1	Duas Partículas Interagentes num Bilhar 1D . . . . .	47
5.1.1.1	Cálculo do Expoente de Lyapunov . . . . .	52
5.1.2	Duas Partículas num Bilhar 1D Interagindo via Potencial de Yukawa . . .	56
5.2	Resultados Numéricos . . . . .	60
5.2.1	Distribuição dos Expoentes de Lyapunov Máximos a Tempo-Finito $P(\Lambda_t, \gamma)$	60
5.2.1.1	Procedimento Numérico . . . . .	61
5.2.1.2	Caso 1: $\alpha = 0$ (Limite de Longo Alcance) . . . . .	62
5.2.1.3	Caso 2: $\alpha = 10$ (Limite de Curto Alcance de Interação) . . . . .	68
<b>6</b>	<b>Considerações Finais</b>	<b>76</b>
	<b>Referências</b>	<b>79</b>

# 1 *Introdução*

Quando se afirma que a Física é uma ciência exata, o que se quer dizer é que suas leis, uma vez expressas em forma de equações matemáticas, descrevem e predizem os resultados de medidas quantitativas precisas. Geralmente, a descrição macroscópica de um sistema físico clássico real através de um conjunto de equações não-lineares que em princípio determinam a dinâmica de tais sistemas, pode ser feita adequadamente pelas equações de Newton. Entretanto em grande parte dos casos, estas equações não podem ser resolvidas analiticamente. Desta forma, para conhecermos a evolução temporal destes sistemas as equações de Newton devem ser resolvidas numericamente.

A introdução dos conceitos de dinâmica não-linear (caótica) iniciou-se no final do século XIX, com os trabalhos do matemático francês Henry Poincaré [1]. A motivação de Poincaré foi particularmente fornecida pelo problema de três corpos celestes sob o efeito da atração gravitacional mútua. Através da evolução temporal, de um conjunto de condições iniciais, Poincaré foi capaz de mostrar como surgem trajetórias extremamente complicadas, que hoje são chamadas de caóticas. O desenvolvimento da Teoria do Caos recebeu importantes colaborações de outros cientistas, dentre os quais podemos destacar G. D. Birkhoff [2] em meados de 1920, e A. N. Kolmogorov [3, 4] na década de 50. Apesar destes trabalhos, as propriedades dinâmicas caóticas apresentadas por determinados sistemas físicos reais ainda não haviam sido muito bem entendidos. Foi só na década de 80 com o desenvolvimento dos computadores que a situação mudou drasticamente, e muitos dos créditos para isto podem ser conferidos a possibilidade de obtermos soluções numéricas de sistemas dinâmicos onde não é possível obtermos soluções analíticas. Através de tais soluções, o caráter caótico das evoluções temporais em situações de importância prática tornaram-se evidentes e claras [5].

Em muitos sistemas físicos reais presentes em nosso cotidiano, pequenas variações ou alterações nas condições iniciais geram alterações nos resultados finais. Podemos citar como exemplos de tais sistemas: as condições climáticas, onde uma pequena variação na temperatura da água do mar influencia diretamente na quantidade de chuvas em certas estações do ano; ou a queda no valor das ações de uma grande empresa, que acaba afetando às bolsas de valores de todo o mundo. Portanto, uma das principais características dos sistemas dinâmicos caóticos consiste na dependência sensível às condições iniciais. A caracterização quantitativa da sensibilidade às condições iniciais é feita pelos expoentes de Lyapunov [5]. Através dos expoentes de Lyapunov é possível quanti-

ficar a separação exponencial entre duas trajetórias cujas condições iniciais escolhidas são muito próximas, porém levam a soluções totalmente diferentes. Outra forma de medir a sensibilidade às condições iniciais é chamada entropia de Kolmogorov-Sinai (KS), que calcula a entropia por unidade de tempo dos sistemas dinâmicos [6]. De acordo com Oseledec [7], em sistemas dinâmicos ergódicos, onde médias espaciais são equivalentes a médias temporais, os expoentes de Lyapunov calculados a tempo infinito  $\Lambda_\infty$  não dependem das condições iniciais. Contrastando com os expoentes de Lyapunov calculados a tempo infinito  $\Lambda_\infty$ , existem os expoentes de Lyapunov a tempo-finito  $\Lambda_t$ , calculados num intervalo de tempo  $t$  ao longo de uma dada trajetória [5]. Os expoentes de Lyapunov a tempo-finito são quantidades flutuantes (o seu valor pode variar), que podem ainda mudar de sinal dependendo da região relevante do espaço de fases que esta sendo analisada [8]. Estas flutuações determinam o aumento da largura na distribuição dos expoentes de Lyapunov a tempo-finito  $P(\Lambda; t)$ . Deste modo, esta distribuição aproxima-se de uma distribuição Gaussiana, sendo que sua largura depende do intervalo de tempo que os expoentes de Lyapunov a tempo-finito são calculados [9–12]. Se calcularmos os expoentes de Lyapunov a tempo infinito a distribuição  $P(\Lambda; t)$  colapsa assintoticamente a uma função  $\delta$  de Dirac centrada em  $\Lambda_\infty$  [8]. As distribuições estatísticas dos expoentes de Lyapunov têm sido estudadas em inúmeras situações físicas, como por exemplo: fluxos turbulentos [13], partículas interagentes em sistemas com muitas partículas [14], etc.

Bilhares clássicos são bons exemplos de sistemas dinâmicos onde podemos estudar características de movimentos caóticos. Um bilhar clássico pode ser definido como uma região delimitada por contornos (paredes), em que uma ou mais partículas são aprisionadas e movem-se com velocidade constante (se não houver uma força de interação entre as partículas), com trajetórias constantes entre as colisões com as paredes ou contornos [5]. No estudo da dinâmica de partículas confinadas em bilhares podemos observar movimentos caóticos ou regulares ou a coexistência de ambos, dependendo da geometria do bilhar, da interação entre as partículas ou de uma força externa aplicada ao sistema. Estas características contribuíram para que os bilhares tivessem um papel de destaque no início da análise de sistemas dinâmicos não-lineares. Por exemplo, no estudo das propriedades ergódicas do bilhar de Sinai [15] e na análise da dinâmica caótica no bilhar estádio de Bunimovich [16].

Existe uma família muito interessante de bilhares, chamados “bilhares poligonais” [17, 18], que recebem este nome porque apresentam vértices, e por este motivo, vários ângulos. Estes bilhares apresentam propriedades dinâmicas intermediárias entre completamente integráveis e caóticas [19]. Os bilhares poligonais são divididos em duas classes: os bilhares poligonais racionais, onde todos os ângulos são múltiplos racionais de  $\pi$ ; e irracionais, onde pelo menos um dos ângulos é um múltiplo irracional de  $\pi$  [19,20]. Os ângulos nos bilhares poligonais podem ser escritos em termos das razões das massas das partículas. Variando o valor destes ângulos é possível monitorar a dinâmica de tais sistemas. Estes bilhares são estudados clássica e quanticamente por mais de vinte anos [17].

Do ponto de vista quântico, a interação de partículas em bilhares pode ser usada para modelar elétrons em pontos quânticos ( “*quantum-dots*”) [21]. Nestes problemas, os elétrons são confinados num bilhar em forma de disco e sentem o efeito do material que compõe o contorno do bilhar, no caso um semiconductor [22]. Este material pode afetar a repulsão Coulombiana entre os elétrons e alterar a massa efetiva das partículas [23].

O objetivo deste trabalho é estudar e caracterizar a dinâmica de duas partículas interagindo via potencial de Yukawa, aprisionadas num bilhar unidimensional, como função da razão de massas das partículas  $\gamma$ . Nesta pesquisa o trabalho consiste em: deduzir e aplicar o método de cálculo dos expoentes de Lyapunov máximos segundo Benettin ao nosso problema; e calcular numericamente a distribuição dos expoentes de Lyapunov a tempo-finito como função de  $\gamma$ . Através destas duas etapas esperamos mapear a dinâmica no espaço de fases deste sistema. A seqüência do desenvolvimento de nosso trabalho ocorre de forma sistemática conforme será descrito a seguir.

O Capítulo 2 apresenta uma revisão geral dos principais conceitos referentes a sistemas dinâmicos e dinâmica caótica que serão de suma importância no desenvolvimento e explicação do problema físico abordado nesta dissertação. Entre outros tópicos revisaremos os conceitos de: sistemas dinâmicos conservativos e dissipativos, sistemas Hamiltonianos integráveis, expoentes de Lyapunov, sistemas dinâmicos ergódicos e mesclados e armadilhas dinâmicas. Através da teoria ergódica de sistemas dinâmicos, será possível fazer uma conexão entre o cálculo dos expoentes de Lyapunov e a teoria de armadilhas dinâmicas, que é uma área bem conhecida, porém ainda não muito bem entendida. Alguns trabalhos importantes encontrados na literatura referentes às armadilhas dinâmicas são [24–27].

A dedução da extensão do método de Benettin *et al.* [28] por Dellago *et al.* [29] será apresentada no Capítulo 3. Os resultados deduzidos neste capítulo serão de fundamental importância para o cálculo analítico do espectro dos expoentes de Lyapunov do sistema estudado. Como já vimos, o tema desta dissertação consiste de duas partículas interagindo via potencial de Yukawa e aprisionadas num bilhar unidimensional. Para simplificarmos nossos cálculos descrevemos a dinâmica das partículas de acordo com as coordenadas do centro de massa e coordenadas relativas.

No Capítulo 4, definiremos uma nova classe de sistemas Hamiltonianos chamados sistemas pseudo-integráveis. Discutiremos as principais diferenças entre os sistemas integráveis e pseudo-integráveis, apresentando ainda a definição de bilhares clássicos e algumas das aplicações referentes a estes sistemas físicos. Exemplificaremos alguns bilhares que apresentam dinâmica regular e também outros com dinâmica caótica. Faremos também uma revisão e exploraremos alguns resultados de trabalhos encontrados na literatura. Feita esta revisão, terminaremos este capítulo descrevendo o exemplo físico que serve de motivação para nosso estudo.

Finalmente, no Capítulo 5 apresentaremos e discutiremos os resultados obtidos. Inicialmente calcularemos o efeito das colisões das partículas com as paredes e entre si. Posteriormente, aplicare-

mos estes resultados ao método desenvolvido por Dellago *et al.* [29] para provarmos analiticamente que o problema, tema desta dissertação, é caótico a partir do momento que considerarmos o potencial de interação entre as partículas. Como estamos tratando de duas partículas, desenvolveremos todos os procedimentos para este cálculo tendo como referência a partícula 2, estendendo os resultados finais para o sistema. Discutiremos a influência da introdução do potencial de Yukawa no comportamento dinâmico das partículas. Dois casos limites serão analisados numericamente: o caso com  $\alpha = 0$  (potencial Coulombiano) e o caso com  $\alpha = 10$ . Obteremos, para ambos os casos, uma distribuição dos expoentes de Lyapunov máximos a tempo-finito ( $\Lambda_t$ ) com o intuito de descrever a dinâmica do sistema. Através de seções de Poincaré fundamentaremos as conclusões extraídas dos resultados obtidos previamente.

As simulações computacionais utilizadas na obtenção dos resultados numéricos presentes nesta dissertação foram realizadas no sistema operacional Linux no laboratório computacional do departamento de Física da UFPR. A linguagem de programação utilizada foi FORTRAN 77. O integrador usado na resolução de equações de movimento, via método de quadraturas, foi o Runge-Kutta de ordem 4. Os gráficos construídos a partir dos dados obtidos das simulações computacionais foram gerados no programa Gnuplot, versão 4.0. As figuras ilustrativas foram construídas com o programa Xfig, versão 3.2.5-alpha5.

Terminaremos esta dissertação com um apanhado geral deste estudo, apresentando no Capítulo 6 às conclusões e a apresentação de sugestões de trabalhos futuros.



## 2 *Fundamentação Teórica*

*Neste capítulo apresentaremos e discutiremos alguns conceitos teóricos fundamentais no desenvolvimento deste trabalho. Iniciamos com uma breve discussão descrevendo e definindo o conceito de sistemas dinâmicos. Em especial analisaremos os sistemas dinâmicos conservativos. Em seguida, introduziremos os conceitos e definições de sistemas Hamiltonianos integráveis descrevendo os toros estáveis e instáveis. Terminada esta primeira parte passaremos a apresentar os conceitos fundamentais de Caos Clássico. O primeiro tópico da segunda parte deste capítulo refere-se à apresentação do método de redução dimensional desenvolvido por Poincaré em 1899 no estudo do problema dos três corpos, que recebe o nome de Seções de Poincaré. Posteriormente, vamos nos ater à descrição detalhada do cálculo dos chamados números de Lyapunov ou simplesmente expoentes de Lyapunov. Sendo que estes expoentes são de grande importância na caracterização e quantificação da sensibilidade às condições iniciais de sistemas dinâmicos clássicos. Após demonstrarmos o método de cálculo dos Expoentes de Lyapunov definiremos e discutiremos o Teorema Ergódico. Finalizando este capítulo, definiremos o que chamamos de armadilhas dinâmicas e descreveremos três tipos destas armadilhas.*

### 2.1 **Sistemas Dinâmicos e sua Caracterização**

#### 2.1.1 **Sistemas Dinâmicos**

A dinâmica de corpos materiais sempre serviu de motivação em vários campos de pesquisa. O principal objetivo de grande parte dos pesquisadores consiste na determinação de um conjunto de expressões matemáticas que descrevessem a dinâmica de tais corpos (ao menos de forma aproximada). Então, através destas expressões seria possível determinar e prever quais as coordenadas de dado sistema em instantes futuros.

A modelagem matemática do movimento de corpos materiais torna-se simples quando tratados como partículas ou pontos materiais [30]. Este procedimento pode ser implementado quando a dimensão do corpo é desprezível em relação ao movimento descrito por ele, por exemplo: um planeta ser tratado como uma partícula quando se leva em conta a sua órbita em torno do Sol. Tal método sempre pode ser implementado quando consideramos o centro de massa do sistema.

Um sistema dinâmico pode ser definido como uma regra matemática determinística que modela o estado de um sistema, cuja dinâmica varia no decorrer do tempo. Neste caso, o tempo pode ser uma variável contínua ou discreta [5]. Quando os sistemas são representados por um campo vetorial, ou seja, um conjunto de equações diferenciais ordinárias, o tempo é uma variável contínua [5]. A este tipo de sistema dá-se o nome de *fluxo* devido a grande semelhança entre o caminho das trajetórias no espaço de fases, com o caminho descrito por uma partícula imersa num fluido. Seja então, um sistema dinâmico contínuo não-linear e o fluxo  $\phi_t$  a ele associado. Esse fluxo pode dar origem a um sistema dinâmico que evolui no tempo de uma forma discreta, o qual chamamos de *mapa*, representado vetorialmente por

$$\vec{x}_{i+1} = \vec{F}(\vec{x}_i), \quad (2.1)$$

onde  $\vec{x}$  é um vetor  $N$ -dimensional,  $\vec{F}$  é uma função que pode incluir vários parâmetros de controle, e  $i$  um inteiro que representa os passos temporais fixos e discretos, ou passagens sucessivas por uma superfície de seção do fluxo. Se o fluxo  $\phi_t$  é *liso*, ou seja,  $n$ -vezes continuamente diferenciável, então  $\vec{F}$  é chamado *mapa liso* dando origem ao que conhecemos por *difeomorfismo*<sup>1</sup>. A órbita do mapa será então, uma seqüência de pontos  $(x_i)_{-\infty}^{+\infty}$ , definida por (2.1), que é genericamente denominada *equação de diferenças*. Entretanto, como o escopo de nosso trabalho refere-se a sistemas dinâmicos contínuos (*fluxos*), a partir de agora manteremos nosso enfoque apenas nesta classe de sistemas.

Podemos considerar como exemplo de fluxo, um sistema composto por  $N$  equações diferenciais ordinárias, de primeira ordem autônomas, dadas por:

$$\begin{aligned} \frac{dx_1}{dt} &= F_1(x_1, x_2, \dots, x_N), \\ \frac{dx_2}{dt} &= F_2(x_1, x_2, \dots, x_N), \\ &\vdots \\ \frac{dx_N}{dt} &= F_N(x_1, x_2, \dots, x_N), \end{aligned} \quad (2.2)$$

que também podem ser reescritas segundo a notação vetorial, como:

$$\frac{d\vec{x}(t)}{dt} = \vec{F}[\vec{x}(t)], \quad (2.3)$$

sendo  $\vec{x}(t)$  um vetor  $N$ -dimensional e  $\vec{F}[\vec{x}(t)]$  a representação das funções nas variáveis  $(x_1, x_2, \dots, x_N)$  [5].

Existem dois caminhos para se solucionar um conjunto de equações diferenciais: pode-se tentar integrá-lo analiticamente ou resolvê-lo numericamente. A primeira abordagem só é possível em casos muito especiais; a segunda tem o inconveniente de ser válida apenas para a situação calculada: uma nova escolha para os valores das condições iniciais ou dos parâmetros obriga o

---

<sup>1</sup>Ocorre quando um mapa e seu inverso são suaves (diferenciáveis).

cálculo de uma nova solução numérica.

A figura 1 apresenta três caminhos construídos a partir de três condições iniciais, representando um espaço bidimensional com  $N$  momentos  $\vec{p}$  ao longo da abscissa e as  $N$  posições  $\vec{q}$  ao longo da ordenada. Ao espaço onde estes caminhos, chamados *órbitas* ou *trajetórias* estão imersos, chamamos de *espaço de estados* ou *espaço de fases* [5].

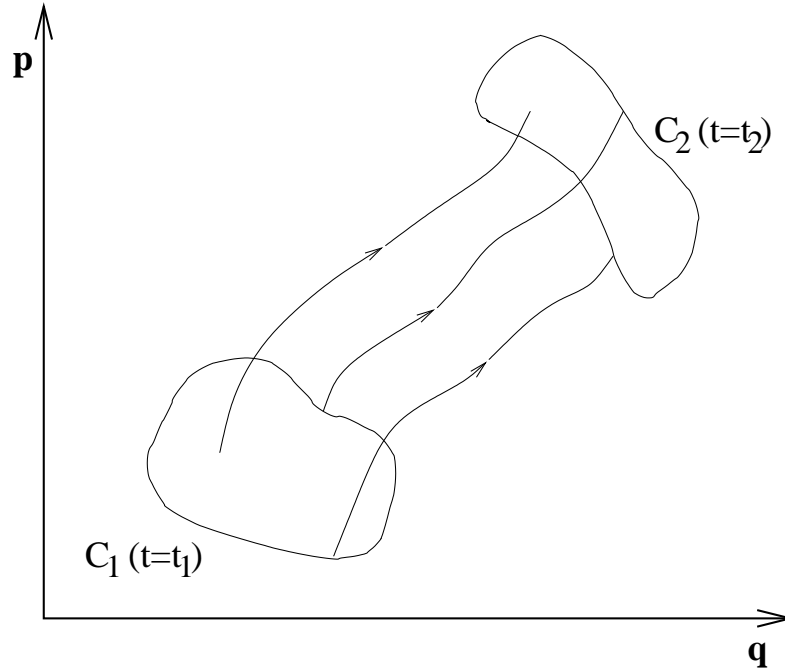


Figura 1: *Trajeto rias no espa o de fases.*

### 2.1.2 Sistemas Conservativos

Considere um determinado “volume” de condi  es iniciais num espa o de fases, cujo objetivo seja o de estudar o que acontece com esse “volume”<sup>2</sup> conforme o tempo passa.

Chamamos um sistema de *conservativo* se, durante a evolu  o temporal, h  preserva  o do volume no espa o de fases conforme prop e o *Teorema de Liouville*<sup>3</sup>. Assim, num sistema conservativo, os pontos num dado volume se movem, com o passar do tempo, de tal modo que, num instante posterior, o volume ocupado por esses pontos permanece inalterado [31].

<sup>2</sup>A palavra volume est  entre aspas para ressaltar que s  se tem, de fato, um volume, quando o sistema   tridimensional. Se o sistema   bidimensional, toma-se uma  rea de condi  es iniciais; se   unidimensional, toma-se um comprimento de condi  es iniciais. Para um sistema com dimens o maior do que tr s, tem-se um hipervolume.

<sup>3</sup>Quando um sistema se move, os pontos de fase  $q_1, \dots, q_f$ ;  $p_1, \dots, p_f$  determinam uma trajet ria no espa o de fases. A velocidade de um ponto de fase   determinada pelas equa  es de Hamilton (2.4). Imagine que cada ponto no espa o de fases seja ocupado por uma “part cula” que se move de acordo com as equa  es de movimento (2.4). Estas part culas descrevem trajet rias que representam todas as hist rias poss veis do sistema. Para cada ponto existir  apenas uma trajet ria poss vel, pois se as posi  es e os momentos, s o conhecidos, a solu  o das equa  es de movimento ser  determinada univocamente. Ent o, o teorema de Liouville estabelece que as “part culas” movem-se como um fluido incompress vel, cujo volume permanece constante.

Em vários sistemas dinâmicos encontramos quantidades físicas que são conservadas ou invariantes perante determinadas transformações. Estas quantidades são chamadas constantes de movimento [30]. Um dos fatores que influenciam diretamente nesta invariância é a simetria do sistema [32]. A conservação do momento linear em sistemas invariantes perante a translação, e a conservação do momento angular em sistemas invariantes perante a rotação, são exemplos típicos da conservação de grandezas físicas.

Quando um sistema dinâmico é classificado como conservativo, isso implica que a energia desse sistema mantém-se constante. A descrição e estudo de sistemas conservativos é realizada através do *formalismo Hamiltoniano*. Entre os vários exemplos de sistemas Hamiltonianos conservativos, podemos destacar os sistemas mecânicos sem atrito e as linhas de campo magnético de um plasma [5].

A dinâmica de um sistema Hamiltoniano pode ser completamente descrita por uma função simples, que chamamos de Hamiltoniana  $H(\vec{p}, \vec{q})$ . A caracterização deste sistema é feita através do momento  $\vec{p}$  e da coordenada  $\vec{q}$ , sendo que ambos possuem a mesma dimensão. Esta descrição é realizada através de  $N$  coordenadas espaciais generalizadas  $(q_1, q_2, \dots, q_N)$  e  $N$  momentos conjugados generalizados  $(p_1, p_2, \dots, p_N)$ , onde  $N$  é o número de graus de liberdade do sistema [30].

A evolução temporal de sistemas Hamiltonianos é regida pelas equações de Hamilton [31], dadas por:

$$\frac{d\vec{q}}{dt} = \frac{\partial H(\vec{q}, \vec{p}, t)}{\partial \vec{p}}, \quad \frac{d\vec{p}}{dt} = -\frac{\partial H(\vec{q}, \vec{p}, t)}{\partial \vec{q}}. \quad (2.4)$$

Um caso especial do formalismo Hamiltoniano ocorre quando não há uma dependência explícita do tempo,  $H = H(\vec{q}, \vec{p})$ . A este tipo de sistema damos o nome de *autônomo*. Conseqüentemente, o valor de  $H = H(\vec{q}(t), \vec{p}(t))$  permanece constante, conforme:

$$\frac{dH}{dt} = \frac{d\vec{q}}{dt} \cdot \frac{\partial H}{\partial \vec{q}} + \frac{d\vec{p}}{dt} \cdot \frac{\partial H}{\partial \vec{p}} = \frac{\partial H}{\partial \vec{p}} \cdot \frac{\partial H}{\partial \vec{q}} - \frac{\partial H}{\partial \vec{q}} \cdot \frac{\partial H}{\partial \vec{p}} = 0, \quad (2.5)$$

ou seja, identificando o valor da Hamiltoniana como a energia  $E$  do sistema, vemos que a energia é uma quantidade conservada para sistemas autônomos,  $E = H(\vec{q}, \vec{p}) = (\text{constante})$  [5, 31]. Uma das conseqüências da conservação do volume do espaço de fases para sistemas Hamiltonianos refere-se ao *teorema de recorrência de Poincaré*<sup>4</sup>.

<sup>4</sup>Este teorema consiste em inicialmente escolhemos um dado ponto inicial no espaço de fases e rodearmos este ponto com uma esfera  $R_0$  (de condições iniciais), com um pequeno raio  $\varepsilon_0$ . Então, o teorema de recorrência de Poincaré prova que algumas das trajetórias geradas a partir destas condições iniciais sempre retornam a essa esfera decorrido um tempo suficientemente longo. Sendo que este retorno independe de quão pequeno for o raio  $\varepsilon_0$  da esfera  $R_0$  [5].

### 2.1.3 Sistemas Hamiltonianos Integráveis

Considere que uma função  $f(\vec{p}, \vec{q})$  seja dita *constante de movimento* de um dado sistema com Hamiltoniana  $H$ . Como  $\vec{p}(t)$  e  $\vec{q}(t)$  evolui com o tempo de acordo com as equações de Hamilton (2.4), o valor da função  $f$  não muda,  $f(\vec{p}, \vec{q}) = \text{constante}$ . Por exemplo, para Hamiltonianas independentes do tempo,  $H$  é uma constante de movimento [5]. De forma geral, diferenciando  $f(\vec{p}(t), \vec{q}(t))$  em relação ao tempo, e admitindo que a Hamiltoniana não dependa explicitamente do tempo, temos que

$$\begin{aligned}\frac{df}{dt} &= \frac{d\vec{p}}{dt} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{p}} + \frac{d\vec{q}}{dt} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{q}}, \\ \frac{df}{dt} &= \frac{\partial H}{\partial \vec{p}} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{q}} - \frac{\partial H}{\partial \vec{q}} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{p}}.\end{aligned}\tag{2.6}$$

O lado direito da equação (2.6), é chamado de *colchetes de Poisson* de  $f$  e  $H$ , e pode ser abreviado como  $[f, H]$ , de acordo com:

$$[g_1, g_2] \equiv \frac{\partial g_1}{\partial \vec{q}} \cdot \frac{\partial g_2}{\partial \vec{p}} - \frac{\partial g_1}{\partial \vec{p}} \cdot \frac{\partial g_2}{\partial \vec{q}}.\tag{2.7}$$

A equação (2.7) pode ser escrita como  $[g_1, g_2] = -[g_2, g_1]$  [5]. Desta forma, a condição de que  $f$  seja uma constante de movimento para uma Hamiltoniana independente do tempo, implica que os colchetes de Poisson com  $H$ , sejam iguais a zero,

$$[f, H] = 0.\tag{2.8}$$

Um determinado sistema com  $N$  graus de liberdade é considerado integrável, se tem  $N$  constantes de movimento independentes  $f_i(\vec{p}, \vec{q})$ ,  $i = 1, 2, \dots, N$  [31], ou seja,

$$[f_i, f_j] = 0,\tag{2.9}$$

para qualquer  $i$  e  $j$ . Se a condição (2.9) for válida para todo  $i$  e  $j$ , então dizemos que as  $N$  constantes de movimento  $f_i$  estão em *involução*. As constantes de movimento  $f_i$  são “independentes” se elas não puderem ser expressas como função das outras  $(N - 1)$  constantes de movimento [5].

Agora considere um sistema integrável onde possamos introduzir uma transformação canônica de variáveis  $(\vec{q}, \vec{p}) \rightarrow (\tilde{\vec{q}}, \tilde{\vec{p}})$ , tal que a nova Hamiltoniana do sistema  $\tilde{H}$  dependa somente de  $\tilde{\vec{p}}$ . Então escolhendo as novas variáveis  $\tilde{\vec{p}}$  como sendo as  $N$  constantes de movimento de acordo com [5], são:

$$\begin{aligned}\frac{d\tilde{\vec{q}}}{dt} &= \frac{\partial \tilde{H}}{\partial \tilde{\vec{p}}} \\ \frac{d\tilde{\vec{p}}}{dt} &= -\frac{\partial \tilde{H}}{\partial \tilde{\vec{q}}},\end{aligned}\tag{2.10}$$

sendo que,

$$\frac{d\tilde{\vec{p}}}{dt} = \frac{\partial \tilde{H}}{\partial \tilde{\vec{q}}} = 0, \quad (2.11)$$

escrevendo assim a nova Hamiltoniana como  $\tilde{H} = \tilde{H}(\tilde{\vec{p}})$ , que não depende explicitamente de  $\tilde{\vec{q}}$  [5, 31]. A relação entre as coordenadas originais e as novas coordenadas é dada pela função geradora  $S(\tilde{\vec{q}}, \tilde{\vec{p}}, t)$  de segunda espécie, que é função da “antiga” coordenada da posição e da “nova” coordenada de momento. As equações de movimento reescritas em termos da função geradora, são:

$$\begin{aligned} \tilde{\vec{q}} &= \frac{\partial S(\tilde{\vec{q}}, \tilde{\vec{p}}, t)}{\partial \tilde{\vec{p}}} \\ \tilde{\vec{p}} &= -\frac{\partial S(\tilde{\vec{q}}, \tilde{\vec{p}}, t)}{\partial \tilde{\vec{q}}}. \end{aligned} \quad (2.12)$$

A escolha de uma transformação em que os novos momentos tornam-se constantes de movimento, é arbitrária. Dentre as várias opções escolhemos a transformação ação-ângulo, onde as variáveis transformadas são denotadas por [5]:

$$(\tilde{\vec{q}}, \tilde{\vec{p}}) = (\vec{I}, \vec{\theta}), \quad (2.13)$$

sendo  $\vec{I}$  definido como,

$$I_i = \frac{1}{2\pi} \oint dq_i p_i, \quad (2.14)$$

onde  $i = 1, 2, \dots, N$ .

As variáveis transformadas podem ser escritas em termos da função geradora que será solução da correspondente equação de Hamilton-Jacobi, de acordo com as equações (2.12):

$$\vec{\theta} = \frac{\partial S(\vec{I}, \vec{q})}{\partial \vec{I}}, \quad (2.15)$$

$$\vec{p} = \frac{\partial S(\vec{I}, \vec{q})}{\partial \vec{q}}. \quad (2.16)$$

Deste modo, integrando (2.16) e usando (2.14), obtemos:

$$\Delta S_i = \oint dq_i p_i = 2\pi I_i. \quad (2.17)$$

Aplicando (2.15) na equação (2.17) temos que:

$$\Delta_i \vec{\theta} = \frac{\partial}{\partial \vec{I}} \Delta_i S = 2\pi \frac{\partial}{\partial \vec{I}} I_i, \quad (2.18)$$

que pode ser reescrito como,

$$\Delta_i \vec{\theta}_j = 2\pi \delta_{ij}, \quad (2.19)$$

onde  $\delta_{ij}$  é a delta de Kronecker que é igual a 1 quando  $i = j$  e 0 para  $i \neq j$ . Então, quando obtivermos um ciclo completo das variáveis  $\theta_i$ , a expressão (2.19) será igual a  $2\pi$  [5].

A nova Hamiltoniana pode ser construída em termos das variáveis ação-ângulo independente do ângulo. As equações de Hamilton podem ser escritas da seguinte forma:

$$\frac{d\vec{I}}{dt} = 0, \quad (2.20)$$

$$\frac{d\vec{\theta}}{dt} = \frac{\partial \tilde{H}(\vec{I})}{\partial \vec{I}} \equiv \vec{\omega}(\vec{I}), \quad (2.21)$$

sendo que as soluções de (2.20) e (2.21) são respectivamente:

$$\vec{I}(t) = \vec{I}(0), \quad (2.22)$$

$$\vec{\theta}(t) = \vec{\theta}(0) + \vec{\omega}(\vec{I})t, \quad (2.23)$$

onde  $\vec{\omega}(\vec{I})$  é um vetor  $N$ -dimensional das componentes de velocidade angular.

Uma forma de representar as soluções (2.22) e (2.23) dá-se através de um toro  $N$ -dimensional, sendo a variável ação os raios constantes e a variável ângulo uma variável cíclica que evolui temporalmente, conforme mostrado na figura 2. O conceito de movimento sobre um toros é particu-

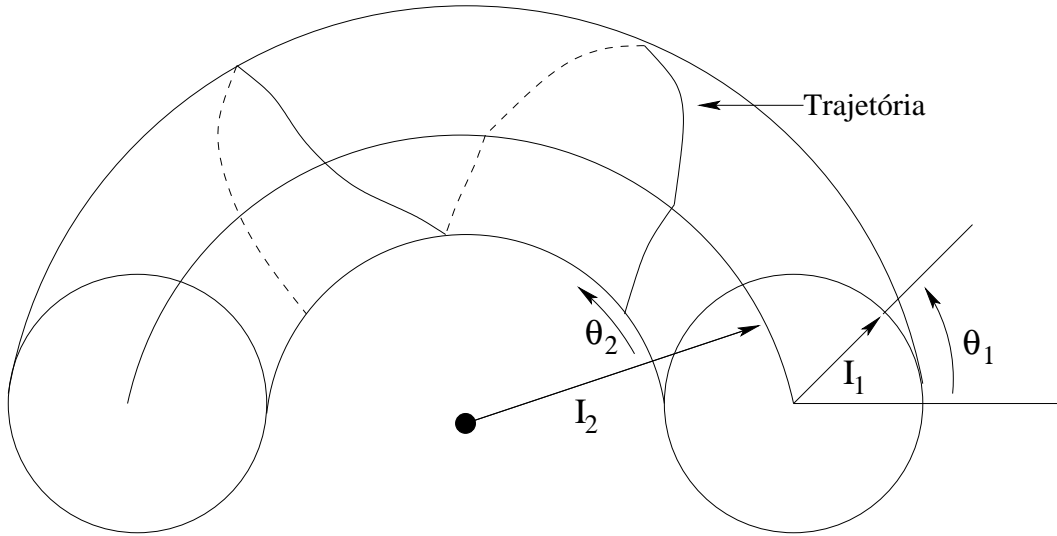


Figura 2: Movimento de um ponto no espaço de fases para um sistema integrável com dois graus de liberdade. O movimento ocorre sobre um toros  $I_1 = \text{const.}$ ,  $I_2 = \text{const.}$ .

larmente útil devido a poder ser generalizado a sistemas com mais de dois graus de liberdade [31].

As trajetórias sobre o toro podem ser analisadas quanto a sua periodicidade ou quase-periodicidade através do vetor velocidade angular  $\vec{\omega}(\vec{I})$  [31]. Quando estivermos tratando de uma trajetória periódica esta obedece a seguinte condição de ressonância [5]:

$$\vec{m} \cdot \vec{\omega} = 0, \quad (2.24)$$

onde  $\vec{m}$  é um vetor de valores inteiros. Podemos exemplificar este procedimento considerando o caso bidimensional ( $N = 2$ ) em que a condição de ressonância (2.24) torna-se:

$$\frac{\omega_1}{\omega_2} = -\frac{m_2}{m_1}, \quad (2.25)$$

sendo que como  $\vec{m}$  só pode admitir valores inteiros, a razão entre as velocidades angulares é um número racional, e por este motivo os toros que satisfazem a condição de ressonância são chamados de toros racionais [5]. Conseqüentemente, quando uma órbita completar  $m_1$  ciclos em  $\theta_1$  e  $m_2$  ciclos em  $\theta_2$ , a órbita se fecha sobre ela mesma, sendo por este motivo chamada de periódica [5].

Quando a condição de ressonância (2.24) não for satisfeita, exceto quando todas as componentes de  $\vec{m}$  são nulas, estaremos tratando do caso quase-periódico. Isso ocorre quando a razão entre as velocidades angulares é um número irracional e a órbita gerada preenche todo o toro nunca voltando ao seu ponto inicial. Então, para o caso quase-periódico estes toros são chamados de toros irracionais [5].

Admitindo uma pequena variação em  $\tilde{H}$  com  $\vec{I}$ , a condição de ressonância (2.24), com  $m \neq 0$ , é somente satisfeita para um conjunto finito de valores de  $\vec{I}$  [5]. Concluí-se então, que a probabilidade de escolher aleatoriamente um toro irracional é muito maior que escolher um toro racional. Conseqüentemente, o espaço de fase para sistemas integráveis é quase totalmente ocupado por toros irracionais [5].

### 2.1.4 Toros Invariantes

Uma questão relacionada aos sistemas integráveis é determinar o quão robusta é a sua integrabilidade quando acrescentada uma certa perturbação. Neste caso, queremos saber como se comporta um toro irracional quando submetido a uma pequena perturbação. Um sistema bidimensional ao qual é introduzida uma perturbação pode ser representado por uma Hamiltoniana como função das variáveis ação-ângulo, da forma:

$$H(\vec{I}, \vec{\theta}) = H_0(\vec{I}) + \varepsilon H_1(\vec{I}, \vec{\theta}), \quad (2.26)$$

onde separamos o Hamiltoniano principal em um Hamiltoniano, integrável, denotado por  $H_0$ , mais um Hamiltoniano relacionado a uma pequena perturbação  $H_1$ . Este tipo de problema foi solucionado em etapas por Kolmogorov (1954) [3] que enunciou a solução (o teorema), Moser (1962) [33] que determinou a solução para mapas, e Arnold (1963) [34] para o caso de fluxos. Portanto, esta solução leva o nome de *teorema KAM*. A dedução deste teorema é muito complexa e foge ao escopo deste trabalho, porém maiores detalhes a respeito desta dedução podem ser encontrados na referência [35]. Neste trabalho, estamos interessados apenas nas condições para que este teorema seja válido. As condições que devem ser satisfeitas, são:



✓ a independência linear das frequências [31] onde

$$\vec{m} \cdot \vec{\omega}(\vec{I}) \neq 0, \quad (2.27)$$

em uma certa região de  $\vec{I}$ , sendo que  $\vec{\omega} = \partial H_0 / \partial \vec{I}$ ;

- ✓ a perturbação tem que ser suave [31] (um número suficiente de derivadas contínuas de  $H_1$ );
- ✓ condições iniciais suficientemente afastadas das ressonâncias [31] (se forem escolhidas condições iniciais próximas ao valor de ressonância o teorema KAM perderá a validade);

Quando estas condições são obedecidas, elas são suficientes para garantir que os toros sobrevivam a uma pequena perturbação ou alteração da sua forma. Estes então, são denominados toros KAM [5].

No caso de uma grande perturbação, todos os toros são destruídos. A terceira condição assegura-nos que o último toro KAM que será destruído é aquele cuja frequência é o “número mais irracional” [31]. Isso porque, nos toros irracionais a condição de ressonância (2.24) não é satisfeita.

Podemos entender o significado de “número mais irracional” através de algumas ferramentas matemáticas da teoria de números. Um número irracional  $R$  pode ser representado através de frações contínuas infinitas [5] na forma,

$$R = a_1 + \frac{1}{a_2 + \frac{1}{a_3 + \frac{1}{a_4 + \dots}}}, \quad (2.28)$$

onde os termos  $a_i$  são inteiros. Truncando a fração em um certo valor de  $a_n$ , obtemos um valor racional próximo do número irracional. Desta forma, o número “mais irracional” é definido como sendo o que se aproxima mais lentamente do valor inteiro da fração (2.28) [5]. O número mais irracional que existe é denominado razão áurea, cujo valor corresponde a  $\frac{1}{2}(\sqrt{5} - 1)$ .

### 2.1.5 Toros Instáveis

Através do teorema KAM é possível garantir a sobrevivência de toros irracionais sob a ação de uma pequena perturbação. Por outro lado, os toros racionais são destruídos quando uma pequena perturbação é acrescentada a um dado sistema. Com o objetivo de visualizar o que acontece quando os toros racionais são destruídos, estudaremos uma superfície de seção de um sistema Hamiltoniano autônomo integrável com dois graus de liberdade ( $N = 2$ ). Neste caso, o toro é representado pelas variáveis ângulo  $\vec{\theta} = (\theta_1, \theta_2)$  e ação  $\vec{I} = (I_1, I_2)$ , sendo que consideramos a seção para  $\theta_2 = \text{constante}$ , conforme exposto na figura 3, [5]. Sem perder a generalidade poderemos analisar as curvas desta figura como círculos concêntricos representados pelas coordenadas polares

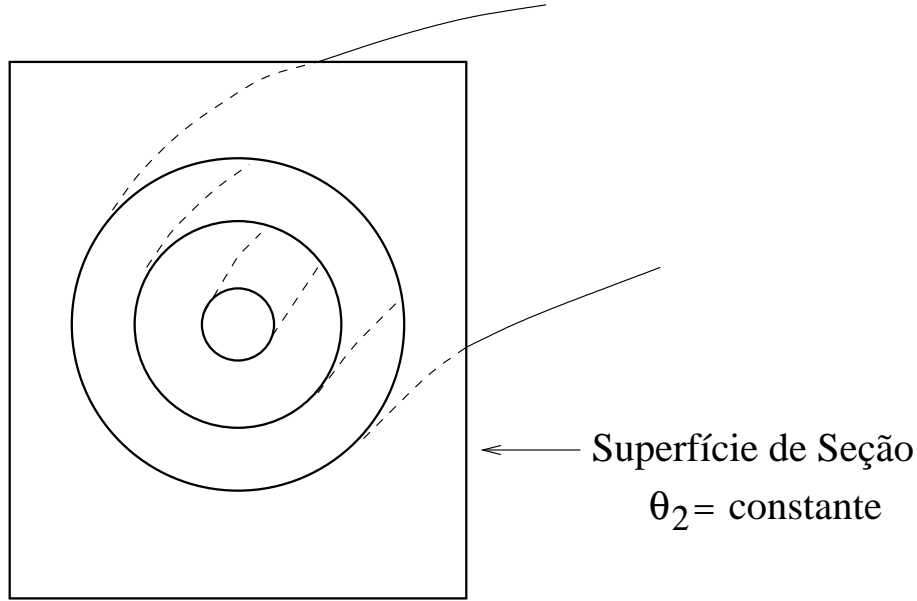


Figura 3: *Superfície de seção de um sistema integrável.*

$(r, \phi)$ . Assim, obtemos o seguinte mapa [5]:

$$(r_{i+1}, \phi_{i+1}) = M_0(r_i, \phi_i), \quad (2.29)$$

onde,

$$M_0 = \begin{cases} r_{i+1} = r_i \\ \phi_{i+1} = [\phi_i + 2\pi R(r_i)] \mod 2\pi \end{cases}, \quad (2.30)$$

que constitui o chamado mapa de torção [31]. A quantidade  $\phi_i$  é o valor de  $\theta_1$  no  $i$ -ésimo furo na superfície de seção pela órbita [5]. Sobre o toros ressonante o número de rotação  $R(r_i)$  é racional, da forma:

$$R(r_i) = \frac{\omega_1}{\omega_2} = \frac{m}{n}, \quad (2.31)$$

e representa a razão das frequências, sendo  $m$  e  $n$  dois números inteiros [5]. Substituindo (2.31) em (2.30), e considerando um ponto sobre um círculo de raio  $r_0$  e  $\phi_0$  e aplicando o mapa  $n$  vezes, teremos

$$M_0^n = \begin{cases} r_n = r_0 \\ \phi_n = \phi_0 + 2\pi \frac{m}{n} n \rightarrow \phi_n = \phi_0 + 2\pi m \end{cases}, \quad (2.32)$$

mostrando que o mapa  $M_0^n$  retorna ao ponto original do círculo. Neste caso,  $\phi_0$  é um ponto fixo do mapa  $M_0^n$ .

Considerando uma perturbação  $\varepsilon H_1$  sobre  $H_0$  ao mapa de torção, teremos:

$$M_\varepsilon = \begin{cases} r_{i+1} = r_i + \varepsilon f(r_i, \phi_i) \\ \phi_{i+1} = \phi_i + 2\pi R(r_i) + \varepsilon g(r_i, \phi_i) \end{cases}. \quad (2.33)$$

O objetivo agora é descrever a dinâmica dos postos fixos. Portanto, na figura 4-(a) apresentamos um círculo de raio  $r$  com  $R = m/n$ , localizado entre dois círculos  $r_+$  e  $r_-$ . No caso de  $r_+$  temos

$R > m/n$ , e em  $r_-$  temos  $R < m/n$ , sendo que o mapa  $M_0^n$  para  $r_+$  gira no sentido anti-horário e  $r_-$  no sentido horário. Quando a perturbação for suficientemente pequena o mapa perturbado  $M_\varepsilon^n$  continua gerando torções [5]. Este mapa gera uma curva  $r_\varepsilon$  próxima a  $r$ , conforme podemos visualizar na figura 4-(b). Sobre a curva  $r_\varepsilon$  aplicamos o mapa  $M_\varepsilon^n(r_\varepsilon)$ , resultando em uma nova

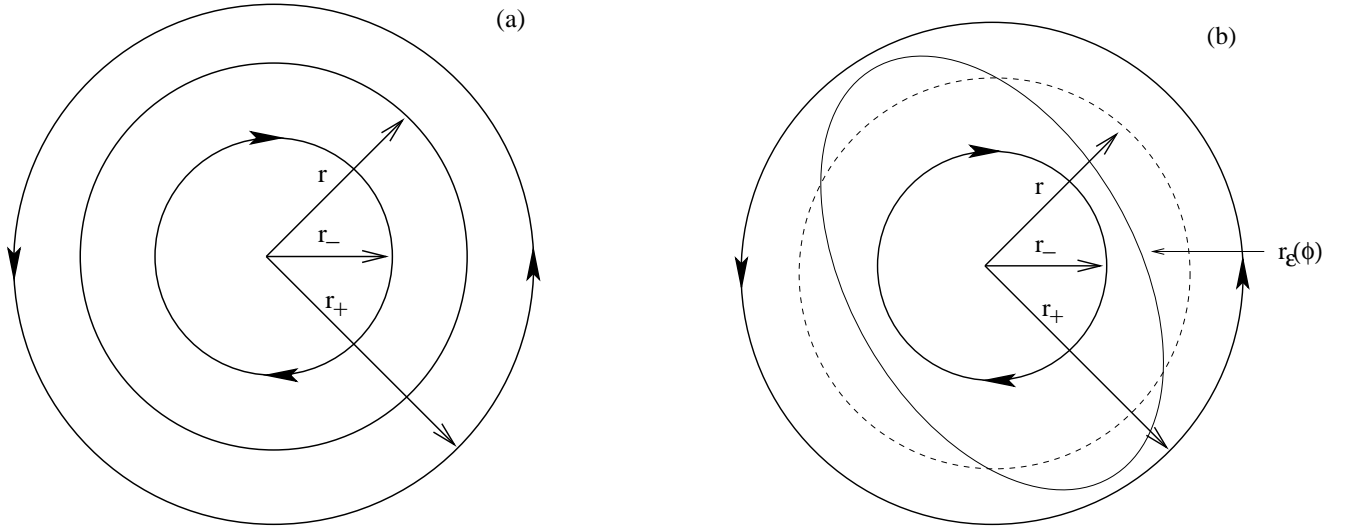


Figura 4: (a) Três círculos invariantes do mapa sem perturbação. (b) A curva  $r = r_\varepsilon(\phi)$ .

curva que intercepta a curva  $r_\varepsilon$  um número par de vezes [5, 31], conforme a figura 5. Como consequência da preservação da área para sistemas conservativos, a área entre as curvas  $r'_\varepsilon$  e  $M_\varepsilon^n$  devem ser iguais e manterem-se constantes [31].

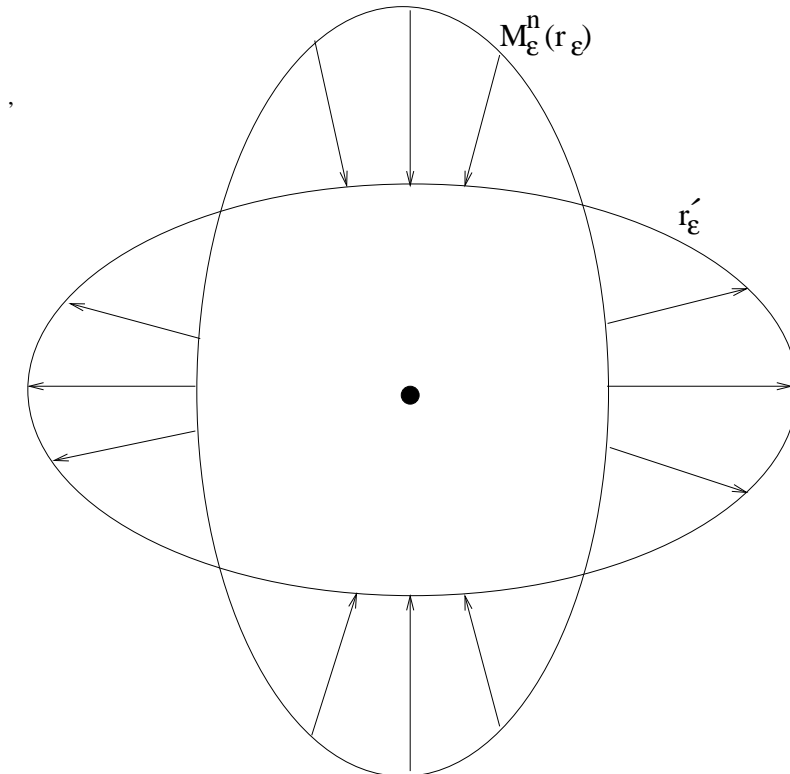


Figura 5: Representação da curva  $r_\varepsilon$  juntamente com a aplicação do mapa de torção a esta curva.

Os pontos de intersecção entre  $r'_\varepsilon$  e  $M_\varepsilon^n$  são os novos pontos fixos do mapa de torção perturbado. Estes pontos fixos alternam entre elípticos e hiperbólicos, conforme figura 6.

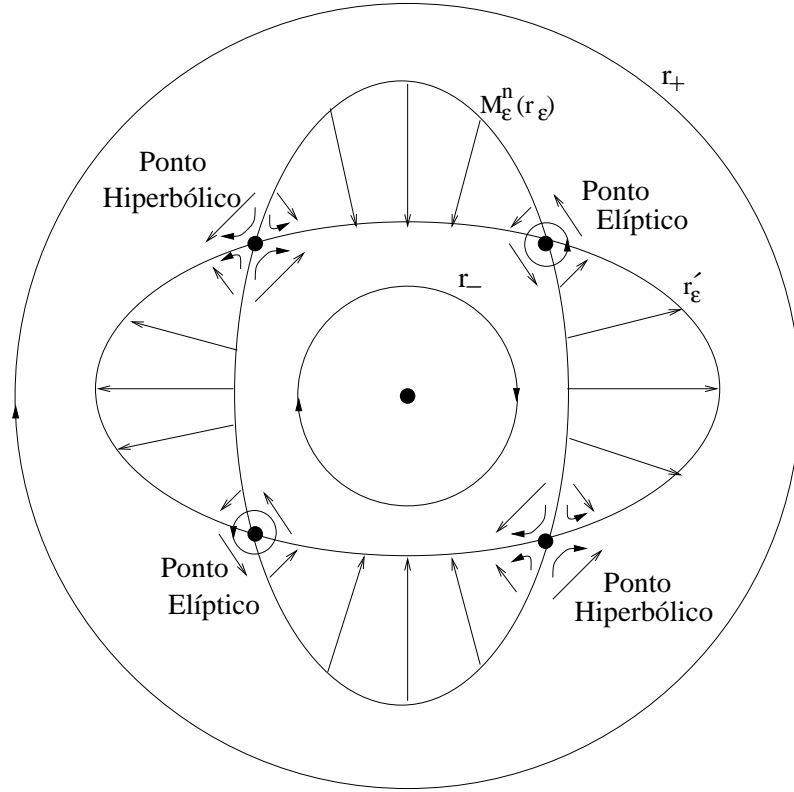


Figura 6: Ilustração do teorema de Poincaré-Birkhoff. Pontos fixos elípticos e hiperbólicos de  $M_\varepsilon^n(r_\varepsilon)$  alternam-se.

A perturbação do toro ressonante com número de rotação racional  $m/n$  resulta em um número igual de pontos fixos elípticos e hiperbólicos de  $M_\varepsilon^n$ . Este resultado é conhecido como o *teorema de Poincaré-Birkhoff* [36]. A transição de um toro racional  $n = 3$  e  $n = 4$  do caso não perturbado para o caso perturbado é ilustrada nas figura 7-(a) e (b) [5].

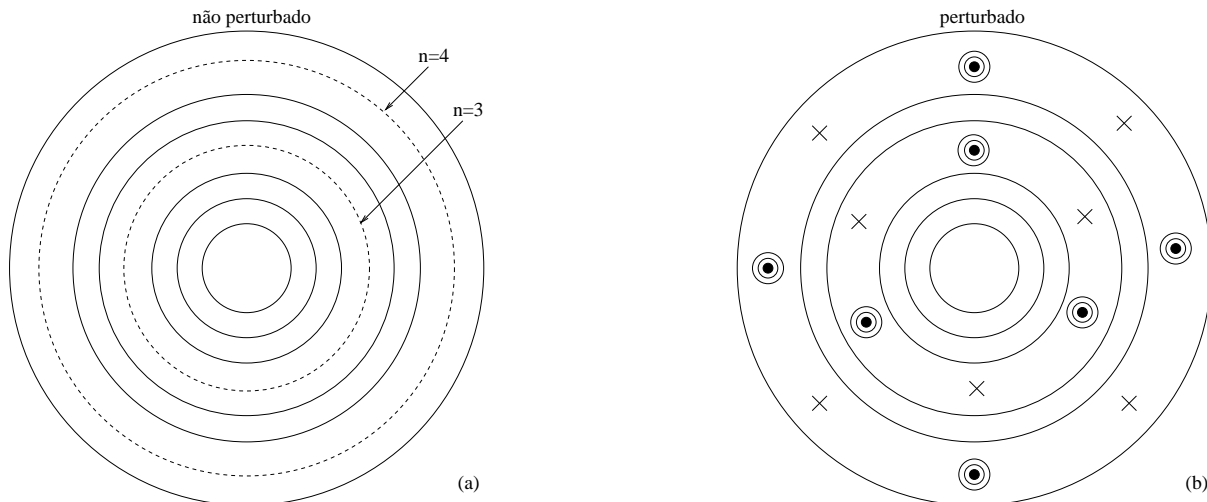


Figura 7: Representação da seção de um toros com ressonâncias  $n = 3$  e  $n = 4$  para os casos (a) não-perturbado e (b) perturbado.

## 2.2 Conceitos de Caos Clássico

O estudo de sistemas dinâmicos clássicos com “poucos” graus de liberdade serviu como base de uma nova classe de métodos teóricos e computacionais chamada de *Caos em Sistemas Dinâmicos Clássicos* ou simplesmente *Caos em Sistemas Dinâmicos*. Um sistema amplamente estudado, e que pode ser adotado como um paradigma para essa classe de sistemas caóticos, é o pêndulo simples amortecido e forçado, que dependendo dos parâmetros e condições iniciais escolhidos para seu movimento, apresenta uma grande quantidade de soluções caóticas [5, 37, 38]. Os conceitos físicos e ferramentas matemáticas utilizados na descrição e caracterização desta nova classe serão apresentados a seguir.

### 2.2.1 Seções de Poincaré

Uma forma usual de simplificar o estudo de sistemas dinâmicos dá-se através das chamadas Seções de Poincaré, cujo nome é uma homenagem ao cientista francês Henri Poincaré que em 1899 foi o primeiro a utilizar este método no estudo do problema dos três corpos [38].

Uma das maneiras pela qual um fluxo contínuo dá origem a um mapa discreto é pela utilização de *seções de Poincaré*. A seção de Poincaré é uma maneira de reduzir o estudo de um fluxo num espaço de fases com  $N$  dimensões a uma aplicação, chamada *mapa de Poincaré* ou *mapa do retorno*, num espaço de fases com  $(N - 1)$  dimensões [31].

Podemos destacar como principais vantagens na utilização das seções de Poincaré:

- ✓ REDUÇÃO DIMENSIONAL – Através das seções de Poincaré reduzimos um espaço de fase  $N$ -dimensional a um espaço de  $(N - 1)$  dimensão, ou seja, eliminamos uma variável do problema original [38].
- ✓ DINÂMICA GLOBAL – Para sistemas com baixa dimensionalidade, a integração numérica das equações diferenciais do problema expõem numa forma simples a dinâmica global do sistema [38].
- ✓ CLARIDADE CONCEITUAL – Conceitos físicos, até então difíceis de serem visualizados no sistema original, tornam-se claros quando analisamos as seções de Poincaré [38].

Uma seção de Poincaré é construída da seguinte maneira: considere um fluxo  $N$ -dimensional  $\phi_t$  de equações diferenciais tipo  $\frac{d\vec{x}}{dt} = \vec{F}(\vec{x})$ . Sobre o espaço gerado pelas equações diferenciais é construída uma hiper-superfície  $\Omega$ . Estudamos então, as sucessivas interações entre uma dada trajetória com a superfície  $\Omega$ . Estas interações ocorrem cada vez que a trajetória “fura” a superfície, sempre no mesmo sentido, conforme a figura 8.

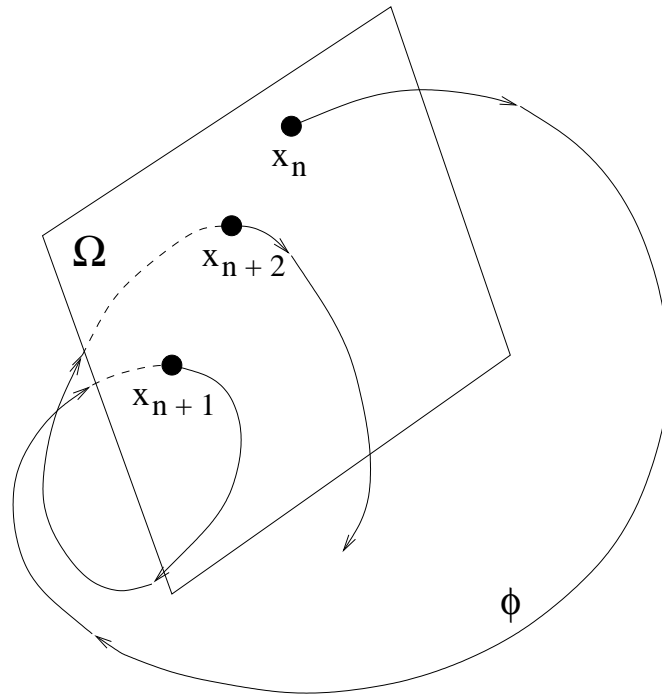


Figura 8: Geometria de uma seção de Poincaré.

Os pontos  $x_n$ ,  $x_{n+1}$  e  $x_{n+2}$  representam respectivamente a primeira, segunda e terceira vez que a trajetória transpõe a hiper-superfície  $\Omega$ . Neste caso o *mapa de Poincaré* é obtido simplesmente considerando-se a intersecção da trajetória com o plano  $\Omega$  [31].

### 2.2.2 Expoentes de Lyapunov

Uma das principais características dos sistemas dinâmicos caóticos refere-se a sensibilidade às condições iniciais. Sendo que duas condições arbitrariamente próximas, após um período suficientemente longo levam a soluções totalmente diferentes. A quantificação da dependência às condições iniciais é feita através dos expoentes característicos de Lyapunov (também chamados de números característicos de Lyapunov ou simplesmente expoentes de Lyapunov) [31].

Com o intuito de definirmos geometricamente os expoentes de Lyapunov de acordo com [37, 39], consideraremos um sistema contínuo descrito por  $N$  equações diferenciais ordinárias. Escolhemos então, uma trajetória iniciando num ponto inicial arbitrário  $x_0$ . Este ponto é envolto por um volume esférico infinitesimal de condições iniciais de raio  $\Gamma_0$ . A evolução temporal deste fluxo nos dá um comportamento assintótico da taxa de expansão (ou contração) local dos eixos da hiper-esfera infinitesimal, transformando-a num elipsóide cujos eixos principais são  $\Gamma_i(t)$ , com  $i = 1, 2, 3, \dots, N$ , conforme figura 9.

Neste caso, os expoentes de Lyapunov são definidos em termos do crescimento exponencial dos eixos principais  $\Gamma_i(t)$  do elipsóide, conforme descrito por [28]. Esta taxa pode ser calculada

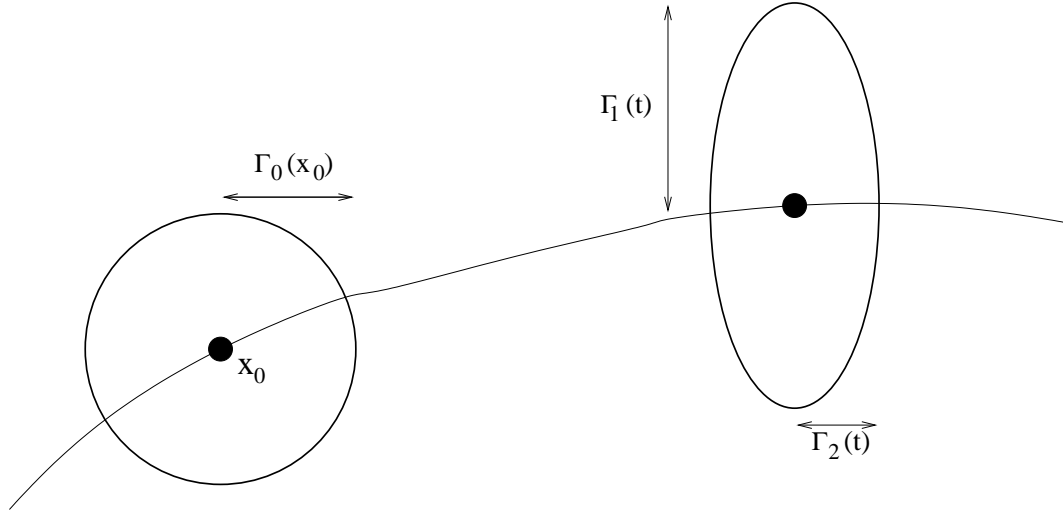


Figura 9: *Evolução temporal de uma esfera bidimensional de condições iniciais.*

através de:

$$\lambda_i = \lim_{t \rightarrow +\infty} \frac{1}{t} \ln \left[ \frac{\Gamma_i(t)}{\Gamma_0} \right], \quad (2.34)$$

ou ainda,

$$\Gamma_i(t) \sim \Gamma_0 \exp \lambda_i t, \quad (2.35)$$

onde os valores de  $\lambda_i$  são ordenados de forma decrescente. Os expoentes de Lyapunov estão relacionados com a natureza da contração ou expansão de diferentes direções no espaço de fases [39]. Desta forma, a orientação do elipsóide muda continuamente conforme o sistema evolui.

Se existir pelo menos um expoente de Lyapunov positivo haverá uma instabilidade orbital nas direções associadas. Para uma solução caótica, a dependência às condições iniciais implica na existência de pelo menos um expoente de Lyapunov  $\lambda_i > 0$  [39]. No caso de uma solução periódica ou quase periódica  $\lambda_i < 0$ , nas direções perpendiculares aos movimento, enquanto que ao longo da trajetória  $\lambda_i = 0$  [31].

Num instante  $t$  o elemento de hiper-volume no espaço de fases é dado por:

$$\delta V(t) = \prod_{i=1}^j \Gamma_i(t). \quad (2.36)$$

Então, substituindo (2.35) em (2.36) teremos:

$$\delta V(t) = \delta V_0 \exp \left( \sum_{i=1}^j \lambda_i t \right). \quad (2.37)$$

Portanto, existem duas situações em que o hiper-volume no espaço de fases não diverge:

- ✓ se  $\sum_{i=1}^j \lambda_i = 0$ , quando  $\delta V(t) = \delta V_0$ , e o sistema é *conservativo*, obedecendo o teorema de Liouville [37];

✓ se  $\sum_{i=1}^j \lambda_i < 0$ , então  $\delta V(t) < \delta V_0$ , caracterizando o sistema como *dissipativo* [37].

### 2.2.3 Cálculo do Expoente de Lyapunov Máximo

Os expoentes de Lyapunov são considerados ferramentas poderosas e indispensáveis na caracterização e descrição de qualquer sistema dinâmico clássico. O expoente positivo de maior valor (geralmente chamado de expoente de Lyapunov máximo) é o principal responsável por essa caracterização.

Atualmente a principal técnica utilizada no cálculo do expoente de Lyapunov máximo foi desenvolvida independentemente por Benettin *et al.* [40, 41] e por Shimada e Nagashima [42] em 1976-78 e meados de 1979, respectivamente. Esta técnica consiste basicamente no seguinte procedimento: considere uma condição inicial  $x(0)$  cuja evolução temporal é governada por um conjunto de equações diferenciais que resolvidas darão origem à chamada *trajetória principal*. Escolhemos então, uma outra condição inicial  $x'(0)$ , que de acordo com o mesmo conjunto de equações, originará uma segunda trajetória chamada *trajetória satélite*, conforme a figura 10. A distância inicial entre a trajetória principal e a trajetória satélite é dada por  $|x(0) - x'(0)| = \Gamma_0$ . Suponha agora, que os dois pontos evoluem durante um tempo  $\tau$ , sendo então que a nova distância entre os pontos  $x_1(\tau)$  e  $x'(\tau)$  é  $\Gamma_1$ . Neste intervalo ( $\Gamma_1$ ) escolhemos um novo ponto  $x''(\tau)$  localizado entre  $x_2(\tau)$  e  $x'(\tau)$  a uma distância  $\Gamma_0$  de  $x(\tau)$ . Repetindo este procedimento por várias vezes poderemos construir uma série da forma  $\Gamma_i$  ( $i = 1, 2, \dots, n$ ) [43].

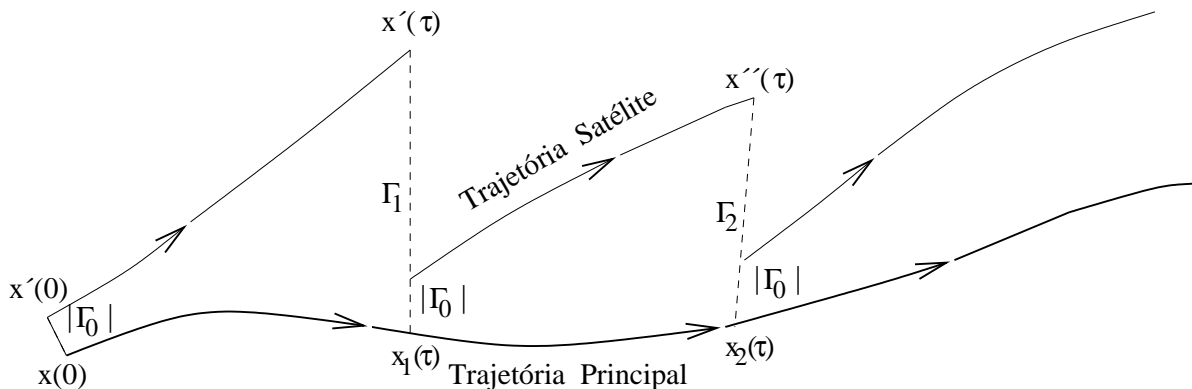


Figura 10: Representação esquemática para o cálculo do expoente de Lyapunov máximo através do somatório das separações das trajetórias satélite em relação a trajetória principal.

Através do procedimento apresentado acima Benettin *et al.* [40], demonstraram que o expoente de Lyapunov máximo pode ser calculado com o auxílio da seguinte equação:

$$\lambda_{max} = \lim_{n \rightarrow +\infty} k_n \quad \text{com,} \quad k_n = \frac{1}{n\tau} \sum \ln \left( \frac{\Gamma_i}{\Gamma_0} \right), \quad (2.38)$$

sendo que, se o sistema estudado for ergódico o cálculo de  $\lambda_{max}$ , não dependerá do sistema de



coordenadas, nem da escolha das condições iniciais [7].

Maiores detalhes da demonstração do cálculo do expoente de Lyapunov máximo e do espectro dos expoentes de Lyapunov em sistemas contínuos, podem ser encontrados nos artigos pioneiros de Benettin *et al.* [40, 41] e [28], respectivamente.

Geralmente, o método do cálculo de  $\lambda_{max}$  pode ser aplicado em sistemas onde o cálculo do espectro dos expoentes de Lyapunov seja, por algum motivo, inviável. Por exemplo, no estudo desenvolvido por R. van Zon *et al.* [44], que calcularam o expoente de Lyapunov máximo para um sistema composto de muitas partículas interagentes.

### 2.2.4 Sistemas Dinâmicos Ergódicos e Mesclados (“*mixing*”)

Uma forma de descrever e analisar fisicamente sistemas dinâmicos, dá-se através do estudo de suas propriedades estatísticas. A teoria estatística sempre se refere a algum tipo de média. Por trás de uma abordagem estatística, temos a validade da *teoria ergódica*. Ergodicidade é uma propriedade de sistemas dinâmicos onde a média temporal de uma função integrável no espaço de fases é igual a uma média espacial desta função [45]. Esta função é chamada função invariante, devido a ela não depender das condições iniciais escolhidas. Um sistema somente pode ser ergódico se uma dada trajetória visitar todas as partes do espaço de fases deste sistema [31]. Esta regra exclui, por exemplo, um sistema em que toros KAM estejam presentes, que é então chamado de *dividido*. Por esse motivo, diz-se usualmente que a região caótica num sistema com dois graus de liberdade acoplados não é ergódico porque, no sistema completo existem toros KAM e portanto, é dividido.

Neste caso, um sistema é considerado ergódico, dependendo do subespaço em que a ergodicidade é definida. Um sistema Hamiltoniano autônomo não pode apresentar uma dinâmica ergódica sobre todo o espaço de fases, devido a energia ser uma constante de movimento. Contudo, o fluxo pode ser ergódico sobre uma superfície constante de energia [31]. Se existirem outras constantes além da energia, então o sistema pode ser ergódico somente num subespaço do espaço de fases que conserve todas estas constantes. Portanto, a principal tarefa no estudo de sistemas Hamiltonianos autônomos é determinar o subespaço em que a ergodicidade existe [31].

Para análise de problemas referentes a Mecânica Estatística fora do equilíbrio podemos encontrar sistemas cujo espaço de fases apresente a chamada *propriedade de “mixing” ou mesclado* [46]. Esta propriedade pode ser definida resumidamente de acordo com o que Arnold [35] propôs: consideremos um recipiente contendo uma mistura composta por 20% de rum e 80% de coca-cola, representando a distribuição inicial de um “fluido incompressível” no espaço de fases. Se sacudirmos o recipiente repetidamente, esperamos que após o fluido estar suficientemente misturado, conseqüentemente todas as partes do recipiente, embora pequena, estejam em contato com “apro-

ximadamente” 20% de rum. Quando especificado rigorosamente, esta breve descrição define um sistema misto [31].

Através do estudo das propriedades estatísticas de funções invariantes é possível caracterizar uma grande quantidade de sistemas dinâmicos. Esta caracterização pode ser dinâmica (expoentes de Lyapunov, entropia de Kolmogorov-Sinai) ou estática (dimensão fractal, espectro de singularidades) [5].

### 2.2.5 Armadilhas Dinâmicas

A teoria contemporânea dos sistemas dinâmicos caóticos trata principalmente de sistemas com poucos graus de liberdade. Existem sistemas dinâmicos caóticos que analisados sob métodos probabilísticos apresentam características diferentes das que esperamos segundo a Física Estatística. O principal objetivo aqui é enfatizar a existência de um tipo específico de “*singularidade*” no espaço de fases, geralmente chamada de *armadilha dinâmica* [27]. Sabemos que em quase todo espaço de fases de sistemas Hamiltonianos poderemos encontrar estruturas e padrões muito complicados, em que regiões caóticas coexistem com regiões regulares ou quase-regulares [5, 31]. Tais armadilhas são também chamadas de *ilhas* que constituem um tubo toroidal que envolve uma órbita fechada localizada na superfície ressonante original.

As armadilhas dinâmicas podem ser definidas como regiões do espaço de fases onde as partículas (ou as trajetórias) podem gastar grandes intervalos de tempo [47], nos quais a dinâmica torna-se quase-regular. Uma das principais características de tais armadilhas são as suas propriedades fractais [27].

Qualitativamente, uma consequência da presença de armadilhas dinâmicas num sistema dinâmico, está relacionada com a diminuição no módulo do valor do expoente de Lyapunov local na armadilha [27], ou seja, a influência das armadilhas aparece no cálculo do expoente de Lyapunov durante o intervalo de tempo que a trajetória permanece aprisionada. Outra consequência deste tipo de singularidade no espaço de fases está relacionada a alteração da dinâmica no transporte de partículas [47]. Neste caso, a descrição do transporte de partículas em uma certa região do espaço de fases, onde a dinâmica regular e caótica coexistem, é feita em termos do que chamamos de “*cantori*”. Os cantori são conjuntos de Cantor que podem ser vistos como remanescentes de curvas KAM que foram destruídas com o incremento do parâmetro de não-linearidade de determinado sistema [47].

Atualmente na literatura, as armadilhas dinâmicas podem ser classificadas de três formas, que serão descritas a seguir.

- *Armadilha de Ilhas-hierárquicas*

Este tipo de armadilha está relacionado à existência de regiões no espaço de fases onde ocorre o aprisionamento de trajetórias por um certo intervalo de tempo (“*stretching time*”), e que mantém uma auto-similaridade com diferentes partes do espaço de fases [24, 48]. Na figura 11, através de seções de Poincaré apresentamos a estrutura de armadilhas de ilhas-hierárquicas presentes na dinâmica do *mapa padrão* ou “*standard map*”.

O mapa padrão é um mapa bidimensional que pode ser definido como:

$$I_{j+1} = I_j + k \sin(\phi_j) \quad \text{mod } 2\pi, \quad (2.39)$$

$$\phi_j = \phi_j + I_{j+1} \quad \text{mod } 2\pi. \quad (2.40)$$

Esse mapa foi investigado por vários pesquisadores, como Chirikov, pois é convenientemente usado para estudar a transição do comportamento regular para o comportamento caótico em sistemas conservativos, conforme se varia o valor do parâmetro de controle  $k > 0$ .

Através das armadilhas de ilhas-hierárquicas é possível descrever fenômenos físicos, como por exemplo o transporte anômalo (devido a uma mudança no valor da constante de difusão), apresentado pelo mapa padrão para determinados valores do parâmetro de não-linearidade [48]. A origem do transporte anômalo está relacionada com as propriedades locais de determinadas regiões do espaço de fases próximas a ilhas de regularidade (na camada de contorno) [49], e às estruturas de auto-similaridade de tais regiões [50].

- *Armadilhas de Rede*

Os mesmos padrões encontrados nas armadilhas de ilhas-hierárquicas descritos no item anterior não aparecem neste tipo de singularidade. Variando o parâmetro de controle de um sistema dinâmico ele pode passar através de diferentes bifurcações. Nestes casos ocorre a criação de uma cadeia de ilhas que vão separando-se aos poucos [27], conforme podemos visualizar na figura 12.

- *Armadilhas de Camada Caótica*

As armadilhas de camada caótica foram discutidas e estudadas inicialmente em [49], na análise da advecção de uma partícula no fluxo de Beltrami. Este tipo de armadilha consiste numa ilha com um ponto elíptico central imerso no mar caótico, conforme figura 13-(a). Com a mudança de determinado parâmetro de controle, uma bifurcação aparece na região onde há a criação de dois pontos elípticos adicionais e um hiperbólico [51], de acordo com a figura 13-(b). As separatrizes apresentadas na figura 13-(c) são destruídas por uma perturbação e são substituídas por uma estreita camada caótica.

O estudo deste tipo de armadilha é utilizado na investigação e entendimento do comportamento super-difusivo que aparece em modelos semi-clássicos de super-redes quadradas (planas), submetidas a campos magnéticos perpendiculares [51]. Em particular no trabalho desenvolvido por Rakhlin [51], foi apresentada uma extensa análise deste tipo de mecanismo

de aprisionamento (armadilhas de camada caótica). Em seus resultados entendemos como uma pequena variação nos parâmetros e na energia do sistema causam uma mudança drástica na dinâmica do modelo analisado.

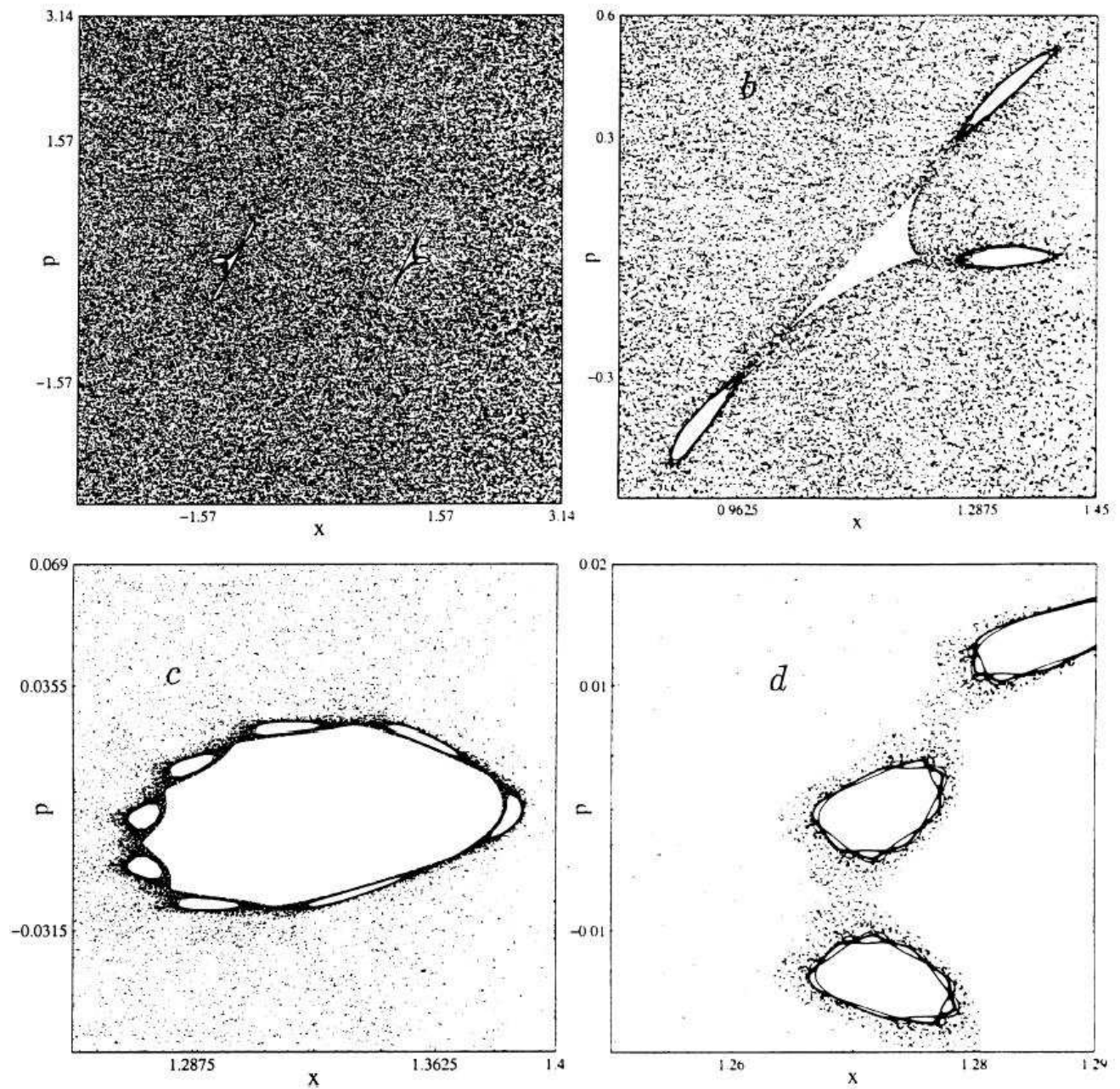


Figura 11: *Exemplo de uma armadilha de ilha-hierárquica com um conjunto de ilhas auto-similares presentes na dinâmica do mapa padrão com  $K = 6,908745$ : (a) espaço de fases completo. (b)-(d) consecutivos ampliações na cadeia de ilhas. Figura extraída de [27].*



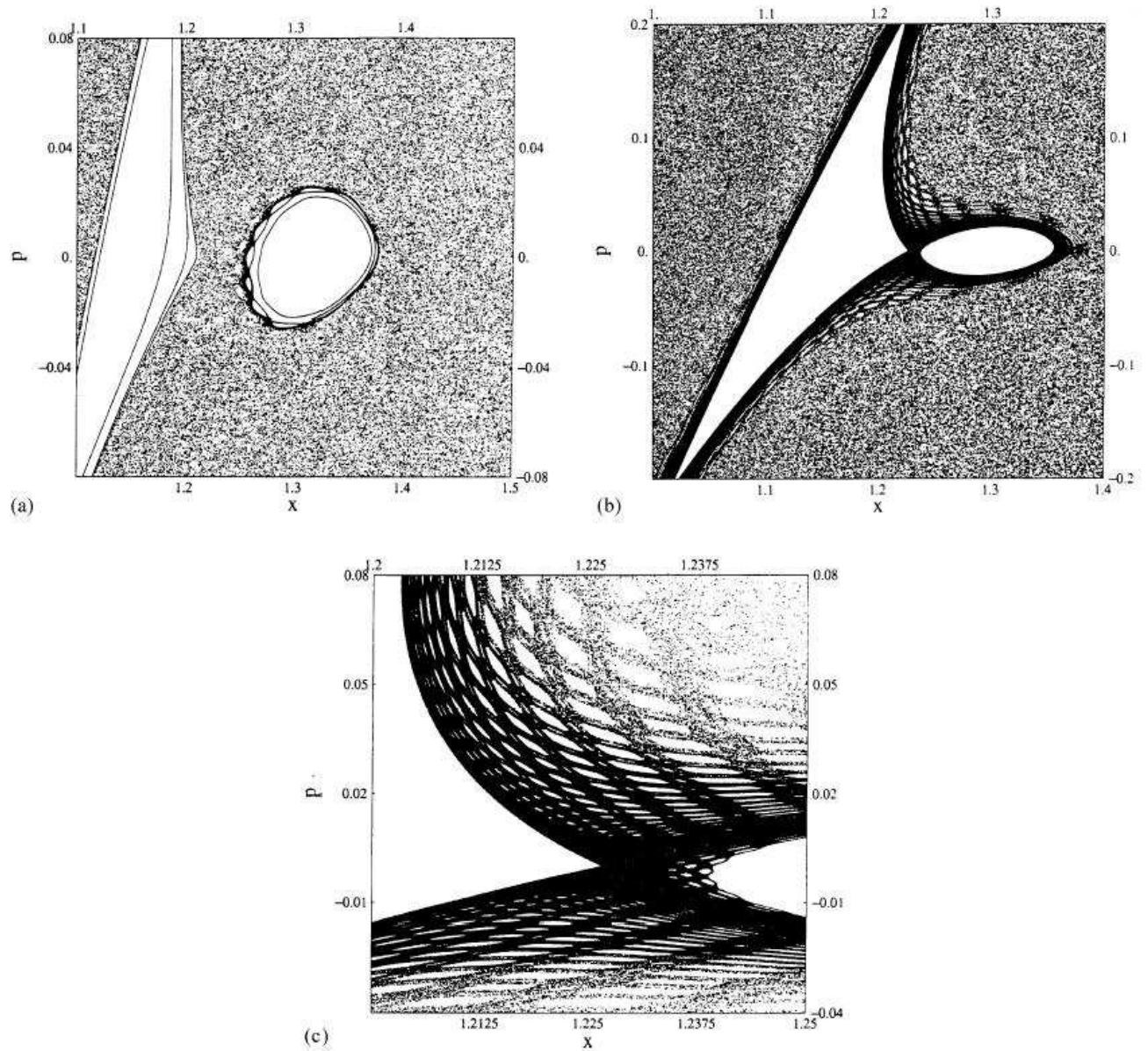


Figura 12: *Exemplo de armadilha de rede no mapa padrão: (a) parte do espaço de fases para  $K = 6,905$ ; (b) uma ilha separando-se ( $K = 6,9009$  e  $10^9$  iterações); (c) ampliação da região de separação apresentada em (b). Figura extraída de [27].*

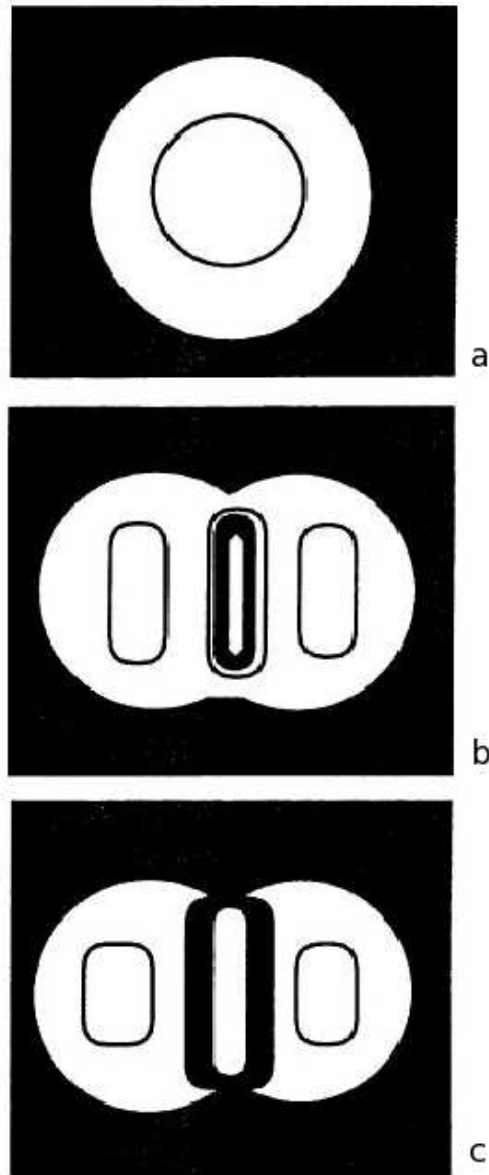


Figura 13: Representação simbólica da evolução da estrutura interna da formação de uma armadilha de camada caótica: (a) estado inicial com um ponto elíptico no centro da ilha rodeado por um mar caótico; (b) bifurcação que cria dois pontos de sela e dois novos pontos elípticos e a separatriz é substituída por uma fina camada caótica; (c) a camada caótica conecta-se com o mar caótico. Figura extraída de [27].

### 3 Extensão do Algoritmo de Benettin

*Uma das principais formas de quantificar a sensibilidade às condições iniciais ocorre através do cálculo dos expoentes de Lyapunov. O cálculo destes expoentes pode ser feito analiticamente, quando possível, ou numericamente. Os códigos numéricos utilizados para este cálculo geralmente são baseados no algoritmo desenvolvido por Benettin et al. [28]. Em seu trabalho Dellago et al. [29] estenderam o algoritmo de Benettin para aplicá-lo em sistemas com muitos graus de liberdade e condições de contorno. Neste capítulo, descreveremos o método desenvolvido por Dellago e faremos algumas análises a respeito de alguns passos na dedução deste algoritmo, pois serão pertinentes à nossa pesquisa. Iniciemos então com uma breve revisão da definição dos expoentes de Lyapunov passando posteriormente a discussão da extensão do algoritmo desenvolvido por Benettin.*

#### 3.1 Expoentes de Lyapunov

Geralmente, sistemas compostos por muitos corpos apresentam uma forte sensibilidade às condições iniciais, de tal forma que dois pontos inicialmente separados por uma pequena distância no espaço de fases tendem a divergir exponencialmente. Neste caso o sistema é considerado caótico. Podemos representar estes sistemas através de um conjunto autônomo de equações diferenciais ordinárias acopladas expresso por:

$$\dot{\vec{\Gamma}} = \vec{F}(\vec{\Gamma}), \quad (3.1)$$

sendo que  $\vec{\Gamma}(t)$  é um vetor  $N$ -dimensional no espaço de fase do sistema. A integração do conjunto de equações diferenciais ordinárias (3.1), resulta na evolução temporal do sistema, também chamado de fluxo de fase [29], e expresso por:

$$\vec{\Gamma}(t) = \Phi^t[\vec{\Gamma}(0)], \quad (3.2)$$

onde  $\Phi^t$  representa um fluxo que mapeia um estado inicial do vetor  $\vec{\Gamma}(0)$  no vetor  $\vec{\Gamma}(t)$ , num intervalo de tempo  $t$ . Chamamos de  $\vec{\Gamma}(t)$  a trajetória referência conectada através de um parâmetro  $s$  a uma trajetória perturbada chamada trajetória satélite, denotada por  $\vec{\Gamma}_s(t)$ , sendo que  $\lim_{s \rightarrow 0} \vec{\Gamma}_s(t) =$

$\vec{\Gamma}(t)$ . O vetor tangente associado a trajetória satélite é definido como:

$$\delta\vec{\Gamma}(t) = \lim_{s \rightarrow 0} \frac{\vec{\Gamma}_s(t) - \vec{\Gamma}(t)}{s}. \quad (3.3)$$

As equações de movimento podem ser obtidas através da linearização de (3.1),

$$\delta\dot{\vec{\Gamma}} = \vec{D}(\vec{\Gamma}) \cdot \delta\vec{\Gamma} \quad \text{ou} \quad \delta\dot{\vec{\Gamma}} = \frac{\partial \vec{F}}{\partial \vec{\Gamma}} \cdot \delta\vec{\Gamma}, \quad (3.4)$$

onde  $\vec{D}(\vec{\Gamma})$  é a matriz Jacobiana do sistema.

No caso de sistemas caóticos esta perturbação cresce exponencialmente. Este fato motiva a definição dos expoentes de Lyapunov de uma trajetória gerada por uma condição inicial  $\vec{\Gamma}(0)$  e uma pequena perturbação inicial  $\delta\vec{\Gamma}(0)$ , sendo que

$$\lambda(\vec{\Gamma}(0), \delta\vec{\Gamma}(0)) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \ln \frac{|\delta\vec{\Gamma}(t)|}{|\delta\vec{\Gamma}(0)|}. \quad (3.5)$$

Para sistemas ergódicos, Oseledec [7] prova em seu trabalho que para quase todas as condições iniciais possíveis existem  $L$  vetores ortonormais. Cada um destes vetores estão associados a um expoente de Lyapunov que independe do sistema de coordenadas. Os expoentes são ordenados em ordem decrescente,  $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_L$ . Como vimos anteriormente, geometricamente os expoentes de Lyapunov podem ser interpretados como as taxas médias de crescimento exponencial dos eixos principais de um elipsóide contornando uma região do espaço de fases e evoluindo de acordo com (3.1). Deste modo, os expoentes de Lyapunov quantificam as propriedades de esticamento e contração do fluxo no espaço de fases.

Os expoentes de Lyapunov em sistemas Hamiltonianos conservativos, apresentam a simetria de par conjugado (“*smale-pair*”), ou seja, a soma de todos os expoentes tem que ser igual a zero, conforme  $\lambda_l + \lambda_{L+1-l} = 0$  para  $l = 1, \dots, L$  [31]. Esta simetria facilita o cálculo numérico do espectro dos expoentes de Lyapunov, pois através dela é possível checar o algoritmo utilizado. Neste tipo de sistema para cada quantidade conservada - como por exemplo, as coordenadas do centro de massa, o momento total e energia total - nas equações de movimento resultará num expoente de Lyapunov de magnitude igual a zero.

Em sistemas dissipativos a simetria par conjugado não é totalmente perdida e também tem um sentido físico. A soma total dos expoentes de Lyapunov é negativa e corresponde a produção de entropia irreversível [52]. Na literatura há também estudos que mostram que a soma de todos os expoentes de Lyapunov podem estar relacionados com os respectivos coeficientes de transporte [53].

Na prática, o cálculo do espectro dos expoentes de Lyapunov, de acordo com o algoritmo clássico de Benettin *et al.* [28], resolve simultaneamente as equações de movimento (3.1) para a trajetória referência  $\vec{\Gamma}(t)$  e as equações de movimento do espaço tangente (3.4) para um conjunto



de vetores  $\{\delta\vec{\Gamma}_l\}$ .

As dificuldades associadas ao tamanho dos vetores iniciais em  $\delta\vec{\Gamma}_l(0)$  e os efeitos de arredondamento do computador são resolvidos por uma reortonormalização do conjunto de vetores. Desta forma, os expoentes de Lyapunov são obtidos a partir dos logaritmos das médias temporais dos respectivos fatores de normalização.

## 3.2 Extensão do Algoritmo

Considerando que o método clássico de Benettin pode ser aplicado a sistemas dinâmicos diferenciáveis, métodos mais refinados são necessários para tratar alguns tipos de sistemas, como por exemplo, modelos físicos com condições periódicas de contorno e mapas discretos. Em 1996, Dellago *et al.* [29] apresentaram uma extensão do algoritmo clássico desenvolvido por Benettin *et al.* [28] para o cálculo do espectro do expoente de Lyapunov em sistemas dinâmicos. Foi possível assim calcular os expoentes de Lyapunov para o bilhar estádio Sinai [54], para o gás de Lorentz em equilíbrio, e também fora do equilíbrio [55, 56]. Então a partir de agora apresentaremos o método de extensão do algoritmo de Benettin usado por Dellago.

Considere um sistema de equações diferenciais ordinárias  $L$  acopladas da forma da equação (3.1), com condições iniciais  $\vec{\Gamma}(0)$ , onde admitimos que a transformação

$$\vec{\Gamma}_f = \vec{M}(\vec{\Gamma}_i), \quad (3.6)$$

é aplicada em tempos discretos  $\{\tau_1, \tau_2, \tau_3, \dots\}$ , e o mapa  $\vec{M}(\vec{\Gamma}_i)$  é considerado diferenciável em relação às variáveis do espaço de fases. Os índices  $i$  e  $f$  denotam o estado inicial e final do mapa  $\vec{M}$ , respectivamente. Nos intervalos de tempo  $\tau_{i+1} - \tau_i$  a trajetória é determinada via integração da equação (3.1). A evolução temporal do conjunto de vetores é obtida por integração da equação (3.4). Considerando os eventos de mapeamento singular nos instantes  $\tau_i$ , a evolução temporal completa no espaço de fases, e no espaço tangente, podem ser escritas como:

$$\vec{\Gamma}(t) = \Phi^{t-\tau_n} \circ \vec{M} \circ \Phi^{t-\tau_{n-1}} \circ \dots \circ \Phi^{\tau_2-\tau_1} \circ \vec{M} \circ \Phi^{\tau_1} \vec{\Gamma}(0), \quad (3.7)$$

$$\delta\vec{\Gamma}(t) = \vec{L}^{t-\tau_n} \cdot \vec{S} \cdot \vec{L}^{t-\tau_{n-1}} \cdot \dots \cdot \vec{L}^{\tau_2-\tau_1} \cdot \vec{S} \cdot \vec{L}^{\tau_1} \cdot \delta\vec{\Gamma}(0), \quad (3.8)$$

onde  $\vec{L}$  é o propagador de  $\delta\vec{\Gamma}$  nos segmentos suaves, e  $\vec{S}$  é a matriz Jacobiana correspondente a  $\vec{M}$  [29]. Formalmente podemos escrever o propagador  $\vec{L}$  como sendo,

$$\vec{L}^{t_2-t_1} = \exp_+ \left\{ \int_{t_1}^{t_2} \vec{D}[\vec{\Gamma}(t')] dt' \right\}, \quad (3.9)$$

onde  $\exp_+$  representa as exponenciais ordenadas no tempo.

A primeira aplicação do mapa  $\vec{S}$  sobre o conjunto de vetores no espaço bidimensional é esque-

matizado na figura 14.

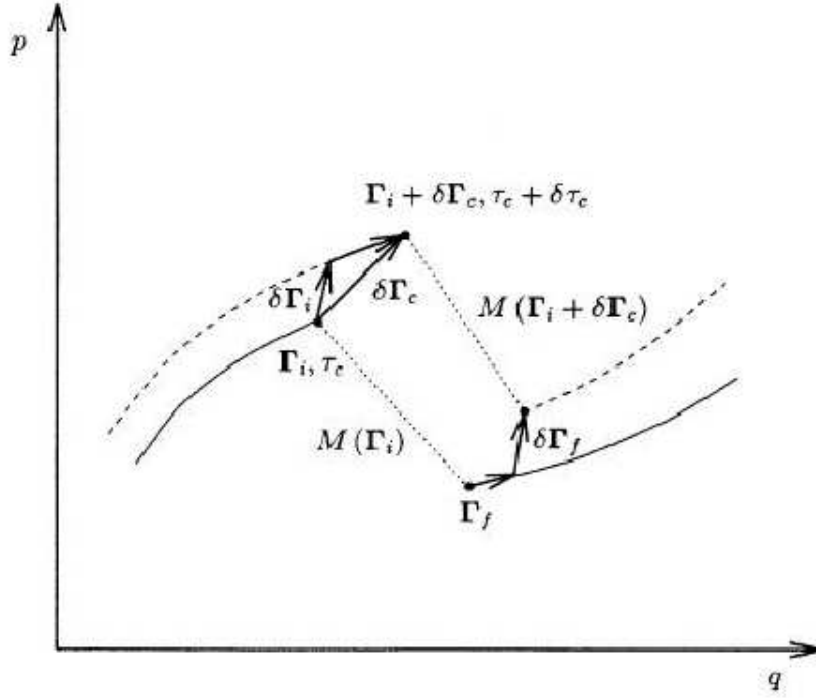


Figura 14: *Efeito de uma transformação descontínua  $\vec{M}$  sobre o conjunto de vetores no espaço tangente do sistema. Figura extraída de [29].*

Cada evento discreto apresentado na figura 14 é chamado de *colisão* [29]. A trajetória referência é representada pelas linhas contínuas e a trajetória satélite é representada pelas linhas tracejadas. Na trajetória referência a *colisão* ocorre no ponto do espaço de fase  $\vec{\Gamma}_i$  no instante  $\tau_c$ . A trajetória satélite muda seu ponto de *colisão* de acordo com um deslocamento  $\vec{\Gamma} + \delta\vec{\Gamma}_c$  num instante também diferente dado por  $\tau_c + \delta\tau_c$ . O tempo de atraso  $\delta\tau_c$  pode ser positivo ou negativo dependendo de qual trajetória colide antes.

O conjunto de vetores  $\delta\vec{\Gamma}_f$  imediatamente após as colisões é dado por:

$$\delta\vec{\Gamma}_f = \vec{M}(\vec{\Gamma}_i + \delta\vec{\Gamma}_c) - \vec{\Gamma}_f(t + \delta t), \quad (3.10)$$

onde para tempos infinitesimais, teremos,

$$\vec{\Gamma}_f(t + \delta t) = \vec{\Gamma}_f(t) + \frac{\partial \vec{\Gamma}_f}{\partial t} \delta t, \quad (3.11)$$

sendo que  $\vec{F}(\vec{\Gamma}_f) = \frac{\partial \vec{\Gamma}_f}{\partial t}$ . Deste modo podemos reescrever (3.11) assim:

$$\vec{\Gamma}_f(t + \delta t) = \vec{\Gamma}(t) + \vec{F}(\vec{\Gamma}_f) \delta t. \quad (3.12)$$

Então, substituindo (3.12) em (3.10), temos que:

$$\delta\vec{\Gamma}_f = \vec{M}(\vec{\Gamma}_i + \delta\vec{\Gamma}_c) - [\vec{\Gamma}(t) + \vec{F}(\vec{\Gamma}_f)\delta t]. \quad (3.13)$$

Utilizando o mesmo procedimento de linearização para  $\delta\vec{\Gamma}_c$  em torno de  $\tau_c$ , obtemos o seguinte:

$$\delta\vec{\Gamma}_c = \delta\vec{\Gamma}_i + \vec{F}(\vec{\Gamma}_i)\delta\tau_c. \quad (3.14)$$

fazendo  $\vec{F}(\vec{\Gamma}_i) = \frac{\partial\vec{\Gamma}_i}{\partial\tau_c}$ , então,

$$\delta\vec{\Gamma}_c = \delta\vec{\Gamma}_i + \frac{\partial\vec{\Gamma}_i}{\partial\tau_c}\delta\tau_c, \quad (3.15)$$

Expandindo  $\vec{M}(\vec{\Gamma} + \delta\vec{\Gamma})$  em torno de  $\vec{\Gamma}$  temos que:

$$\vec{M}(\vec{\Gamma} + \delta\vec{\Gamma}) = \vec{M}(\vec{\Gamma}) + \frac{\partial\vec{M}}{\partial\vec{\Gamma}}\delta\vec{\Gamma}. \quad (3.16)$$

Para o caso de  $\vec{M}(\vec{\Gamma}_i + \delta\vec{\Gamma}_c)$  e com o auxílio de (3.14), a equação (3.16) ficará assim:

$$\vec{M}(\vec{\Gamma}_i + \delta\vec{\Gamma}_c) = \vec{M}(\vec{\Gamma}_i) + \frac{\partial\vec{M}}{\partial\vec{\Gamma}_i} \cdot \delta\vec{\Gamma}_c, \quad (3.17)$$

$$\vec{M}(\vec{\Gamma}_i + \delta\vec{\Gamma}_c) = \vec{M}(\vec{\Gamma}_i) + \frac{\partial\vec{M}}{\partial\vec{\Gamma}_i} [\delta\vec{\Gamma}_i + \vec{F}(\vec{\Gamma}_i) \cdot \delta\tau_c] \quad (3.18)$$

lembrando que  $\vec{\Gamma}_f = \vec{M}(\vec{\Gamma}_i)$ . Deste modo, substituindo (3.18) na equação (3.13) teremos:

$$\delta\vec{\Gamma}_f = \frac{\partial\vec{M}}{\partial\vec{\Gamma}} \cdot \delta\vec{\Gamma}_i + \left\{ \frac{\partial\vec{M}}{\partial\vec{\Gamma}} \cdot \vec{F}(\vec{\Gamma}_i) - \vec{F}[\vec{M}(\vec{\Gamma}_i)] \right\} \delta\tau_c. \quad (3.19)$$

Através desta equação será possível quantificarmos a divergência entre as trajetórias principal e satélite imediatamente após as colisões. O tempo de atraso  $\delta\tau_c$  é uma função de  $\vec{\Gamma}_i$  e de  $\delta\Gamma_i$ . Esta equação é obtida para aproximações lineares no tempo e no espaço de fases. Os ingredientes necessários para aplicação de (3.19) são as equações de movimento para determinarmos o vetor  $\vec{F}(\vec{\Gamma})$ , o mapa  $\vec{M}(\vec{\Gamma})$  e a sua derivada  $\partial\vec{M}/\partial\vec{\Gamma}$  que é a matriz monodrômica. Exemplos de aplicações deste método, considerando-se algumas propriedades geométricas, podem ser encontrados em [54–56].

Conhecendo a matriz que relaciona  $\delta\vec{\Gamma}_f$  com  $\delta\vec{\Gamma}_i$  poderemos determinar o efeito das colisões sobre o cálculo do espectro dos expoentes de Lyapunov através da equação (3.5).

### 3.3 Distribuição dos expoentes de Lyapunov a tempo-finito

A dinâmica dos sistemas conservativos consiste de diferentes tipos de movimentos, isto é, movimentos regular e caótico. Uma das formas mais simples de descrever a dinâmica de tais

sistemas é construir, quando possível, e observar as seções de Poincaré ou simplesmente os mapas conservativos. Nestas seções, pode-se encontrar órbitas periódicas e movimentos quase-periódicos sobre toros na forma de ilhas de regularidade e toros KAM. Devido a estas ilhas estarem imersas no mar caótico a dinâmica dos sistemas Hamiltonianos conservativos depende crucialmente das condições iniciais. Uma forma de mensurar e caracterizar esta dependência às condições iniciais juntamente com o movimento caótico, dá-se através do cálculo dos expoentes de Lyapunov a tempo-finito. Por este motivo esta seção tem por objetivo apresentar a definição da distribuição dos expoentes de Lyapunov a tempo-finito  $P(\Lambda; t)$ .

Através desta distribuição poderemos, no Capítulo 5, caracterizar a dinâmica do problema que serve de motivação para o desenvolvimento desta dissertação. Existem vários estudos na literatura referentes a aplicação dos expoentes de Lyapunov a tempo-finito  $\Lambda_t$  [5, 10, 57, 58]. Em sistemas ergódicos, os expoentes de Lyapunov calculados a tempo infinito  $\Lambda_\infty$ , não dependem das condições iniciais [7]. Como não é possível calcularmos estes expoentes por um tempo infinito, em geral truncamos o tempo em determinado valor, para então obtermos valores consistentes e confiáveis em relação a dinâmica do sistema. Portanto, neste caso os expoentes de Lyapunov a tempo-finito  $\Lambda_t$  e a distribuição destes expoentes  $P(\Lambda; t)$  passam a depender das condições iniciais escolhidas [11,8]. No limite de tempo infinito ( $t \rightarrow \infty$ ), a função distribuição  $P(\Lambda; t)$ , num espaço de fases completamente caótico, tende a um limite da forma  $P(\Lambda; \infty) = \delta(\Lambda - \Lambda_\infty)$ . Para um longo intervalo de tempo, a maior parte da distribuição pode aproximar-se de uma Gaussiana centrada em  $\Lambda_\infty$ , com a largura tendendo a zero quando  $t \rightarrow \infty$  [11,9].

Como vimos anteriormente em sistemas Hamiltonianos que não são hiperbólicos, o movimento regular e caótico podem coexistir no espaço de fases. Isso causa uma grande variação na instabilidade local ao longo de uma trajetória principal caótica [59]. A quantificação destas variações pode ser feita através dos expoentes de Lyapunov a tempo-finito, que medem a separação de trajetórias próximas durante um intervalo de tempo finito. Estas trajetórias podem ser aprisionadas em torno de ilhas de regularidade. Portanto os expoentes de Lyapunov a tempo-finito  $\Lambda_t$ , são poderosas ferramentas na quantificação do efeito destas ilhas no espaço de fases. Deste modo, apresentaremos no Capítulo 5, destinado à discussão dos resultados, uma discussão detalhada da influência da presença de armadilhas dinâmicas no espaço de fases do sistema abordado nesta dissertação. Lembrando que esta influência é descoberta pela distribuição dos expoentes de Lyapunov máximos a tempo-finito.

## 4 *Dinâmica de Partículas Aprisionadas em Bilhares*

*Dedicaremos este capítulo à exposição de uma classe de sistemas Hamiltonianos chamados sistemas “pseudo-integráveis” e a descrição da dinâmica de partículas confinadas em bilhares clássicos. Iniciamos com a definição de sistemas pseudo-integráveis e posteriormente faremos uma discussão a respeito da conexão de tais sistemas com o tema desta dissertação. Terminada esta parte, passaremos a apresentação de algumas aplicações referentes aos bilhares. Alguns trabalhos encontrados na literatura científica referentes a descrição da dinâmica em sistemas compostos por bilhares serão descritos e analisados. O desenvolvimento e interpretação destes tópicos serão de grande importância na discussão dos resultados expostos no Capítulo 5. Finalmente, terminaremos este capítulo introduzindo o problema físico que serviu de motivação para o desenvolvimento desta dissertação.*

### 4.1 Sistemas Pseudo-integráveis

No Capítulo 2, expusemos e discutimos as condições que determinam quando um sistema Hamiltoniano conservativo é integrável. Neste tipo de sistema o movimento no espaço de fases pode ser representado na superfície de um toros com dimensão igual ao do sistema. Agora, vamos apresentar e definir uma nova classe de sistemas Hamiltonianos com  $N$  graus de liberdade,  $N$  constantes de movimento, onde o movimento no espaço de fases não está confinado na superfície de um toros  $N$ -dimensional. Estes sistemas são chamados de *pseudo-integráveis* [17]. No caso dos sistemas integráveis o fluxo pode ser representado através da construção de campos vetoriais, que não apresentam nenhum tipo de singularidade. Por outro lado, quando os sistemas são pseudo-integráveis, os campos vetoriais, gerados a partir das constantes de movimento, apresentam singularidades que causam o aprisionamento do fluxo sobre uma esfera que apresenta “buracos” em sua superfície. À quantidade de buracos presentes na superfície destas esferas chamamos de *número genus* ou simplesmente *genus* [17].

Um exemplo de sistema pseudo-integrável foi apresentado em 1981 por Richens e Berry [17]. Naquele trabalho, eles descreveram o movimento de partículas num bilhar poligonal bidimensional

fechado, em que todos os ângulos eram múltiplos racionais de  $\pi$ . Por este motivo (os ângulos serem múltiplos racionais de  $\pi$ ), tais bilhares são conhecidos como “bilhares poligonais racionais”, e a dinâmica destes sistemas ocorre na superfície de uma esfera que apresenta vários buracos ou genus  $g$ . Nestes “bilhares racionais” uma dada trajetória pode somente ter um número finito de direções possíveis e assim descrever uma superfície invariante no espaço de fases que pode ser no máximo bidimensional [17, 18]. Por outro lado, se os ângulos de um bilhar poligonal forem múltiplos irracionais de  $\pi$ , esperamos que uma dada órbita evolua em todas as direções [17, 18]. Apesar de não existirem provas matemáticas, é possível conjecturar que quase todos os bilhares poligonais irracionais são ergódicos [18, 60].

Richens e Berry [17] desenvolveram um método para construir as superfícies invariantes e mostrar que estas, em geral, não são toros. Conseqüentemente, as variáveis ação definidas não são únicas, sendo que neste caso, o movimento não pode ser integrado pela transformação destas variáveis [61]. Esta é a razão da escolha do termo “pseudo-integrável”. A dinâmica em sistemas pseudo-integráveis apresenta propriedades caóticas, que surgem não da divergência de pares de trajetórias vizinhas, mas da interrupção abrupta das trajetórias causada pelos contornos dos vértices poligonais.

### 4.1.1 Construção de Superfícies Invariantes Clássicas

A partir de agora vamos descrever as superfícies invariantes clássicas construídas no espaço de fases que contém toda a dinâmica do sistema composto pelos bilhares poligonais racionais. Enunciaremos brevemente três métodos utilizados na construção de tais superfícies, de acordo com o que foi proposto na referência [17].

O primeiro método pode ser enunciado da seguinte forma: considere que o caminho geométrico de uma partícula movendo-se livremente em uma região fechada é independente de sua energia [17]. Conseqüentemente, o movimento pode ser considerado como se estivesse numa região tridimensional do espaço de fases. Existe uma forma elegante de representar a trajetória da partícula movendo-se no interior do bilhar poligonal racional. Esta forma baseia-se na construção da superfície invariante no espaço de fases que contém a dinâmica do sistema. Para construir estas superfícies invariantes, considera-se que cada colisão da partícula com os contornos corresponde à conexão entre o bilhar original (onde ocorre a colisão) e à cópia gerada após cada colisão. No caso de polígonos racionais, todas as possíveis trajetórias podem produzir somente um número finito de diferentes cópias orientadas do bilhar poligonal racional original. Existe uma receita geral de como “colar” estas cópias, para construir tal superfície. Portanto, podemos desenhar uma trajetória com linhas retas refletindo o bilhar, em vez da trajetória, cada vez que ocorre uma colisão com os contornos [60]. Ou seja, cada colisão da partícula com os contornos é equivalente a duplicação do bilhar, sendo que o nova superfície (bilhar) será “colada” ao contorno em que ocor-

reu a colisão, conforme figura 15. Se o bilhar poligonal racional for um triângulo (com todos os

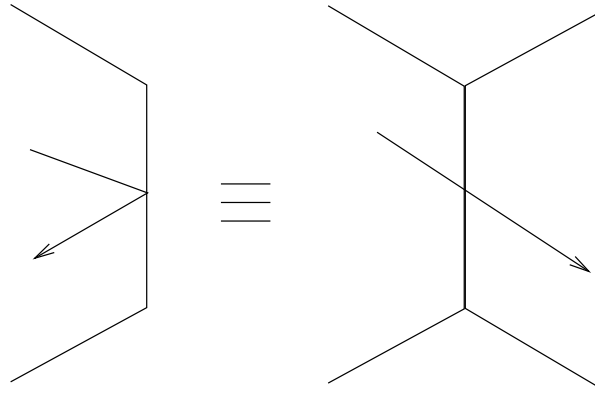


Figura 15: *Ilustração do esquema de reflexão. Cada colisão da partícula com os contornos é equivalente a duplicação do bilhar.*

ângulos racionais), será possível construir a superfície no espaço de fases que contenha a dinâmica deste sistema. Tal superfície recebe o nome de: “roseta” [19].

A roseta pode ser construída da seguinte forma: inicie com um triângulo com ângulos  $\alpha$  e  $\beta$ , conforme a figura 16-(a). Refletindo o triângulo sobre o lado  $AC$ , a imagem sobre o lado  $BC$  e a imagem resultante novamente sobre o lado  $AC$ , será possível construir um losango conforme as regiões hachuradas nas figuras 16-(b) e (c). Este losango é rotacionado em torno do ponto  $A$  várias vezes. O resultado desta rotação é a superfície do espaço de fases, que contém a dinâmica do sistema. A figura 16-(b), é um exemplo deste procedimento de rotação. Teremos uma superfície fechada da forma de 16-(c), apenas se a condição  $n\alpha = \pi$  [19], com  $n = 1, 2, \dots$ , for satisfeita.

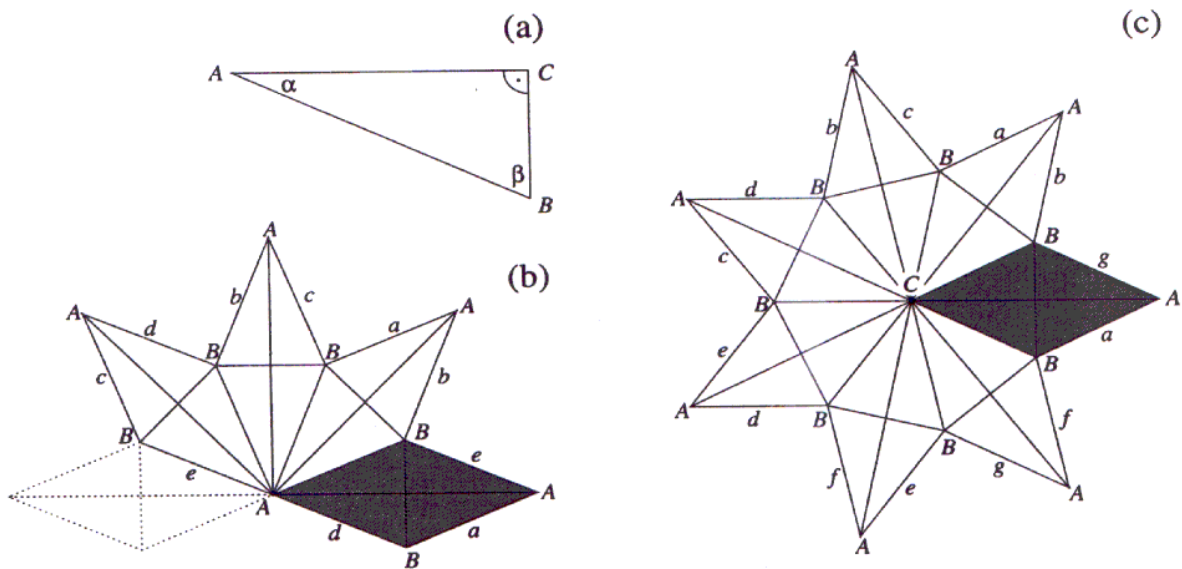


Figura 16: (a) *Bilhar triangular*; (b) *Exemplo do procedimento de rotação gerando uma superfície invariante*; (c) *Superfície invariante no espaço de fases. Figura extraída de [19].*

O número de rotações para  $2\alpha$  é exatamente o menor inteiro  $\zeta$  que satisfaz a condição:

$$2\alpha\zeta/\pi \in \mathbb{N}. \quad (4.1)$$

É possível também rotacionar o losango para  $2\beta$  em torno do ponto  $B$ , resultando numa representação diferente da superfície apresentada na figura 16 [19]. Entretanto, o número de rotações, ou de losangos necessários para construir a superfície são os mesmos, conforme veremos a seguir. Deste modo, sejam as relações:

$$\alpha = \frac{m}{n}\pi, \quad (4.2)$$

$$\beta = \frac{m'}{n'}\pi. \quad (4.3)$$

Então, substituindo (4.2) em (4.1), teremos:

$$2\zeta\frac{m}{n} = l, \quad (4.4)$$

onde  $l$  é qualquer número natural.

A soma dos ângulos internos de um losango é dada por:

$$2\alpha + 2\beta + 2\alpha + 2\beta = 2\pi, \quad (4.5)$$

e isolando  $\alpha$  então chegaremos a uma expressão da forma:

$$\alpha = \frac{\pi}{2} - \beta, \quad (4.6)$$

$$\alpha = \frac{\pi}{2} - \frac{m'}{n'}\pi. \quad (4.7)$$

Substituindo (4.2) em (4.7), teremos:

$$\frac{m}{n} = \left( \frac{1}{2} - \frac{m'}{n'} \right). \quad (4.8)$$

Finalmente, substituindo (4.8) em (4.4) e aplicando este procedimento no caso da rotação ocorrer em torno de  $2\beta$  chegaremos às seguintes relações:

$$2\zeta\frac{m}{n} = l = 2\zeta\left(\frac{1}{2} - \frac{m'}{n'}\right) \Rightarrow 2\zeta\frac{m}{n} = \zeta - l, \quad (4.9)$$

$$2\zeta'\frac{m'}{n'} = l' = 2\zeta'\left(\frac{1}{2} - \frac{m}{n}\right) \Rightarrow 2\zeta'\frac{m}{n} = \zeta' - l'. \quad (4.10)$$

Deste modo, de acordo com (4.9) temos que  $2m < n$  e conseqüentemente  $\zeta - l > 0$ . Mas como  $\zeta'$  é o menor inteiro de tal forma que  $2\zeta'm'/n' \in \mathbb{N}$ , então:  $\zeta' \leq \zeta$ . Usando o mesmo argumento para (4.10) é possível mostrar que:  $\zeta \leq \zeta'$ . Portanto,  $\zeta = \zeta'$ , provando que o número de rotações



ou de losangos necessários para construir a superfície invariante é o mesmo, para ambas as rotações (em torno do ponto A ou do ponto B).

O segundo método, com caráter algébrico, consiste em calcularmos o genus  $g$  da superfície construída através do primeiro método. Os losangos definem uma triangularização na superfície. Por isso, contando o número de faces  $F$ , lados  $E$  e vértices  $V$  na triangularização, o genus poderá ser calculado [60]. Os sistemas que apresentam o número genus  $g = 1$  são integráveis e para todos os outros valores do número genus os sistemas são chamados pseudo-integráveis [19].

O terceiro método refere-se ao chamado “bilhar toros quadrado” (figura 17), consistindo de um toros fechado (isto é, um quadrado com condições periódicas de contorno) contendo um obstáculo quadrado no centro [17]. No bilhar toros quadrado, o quadrado das componentes dos momentos

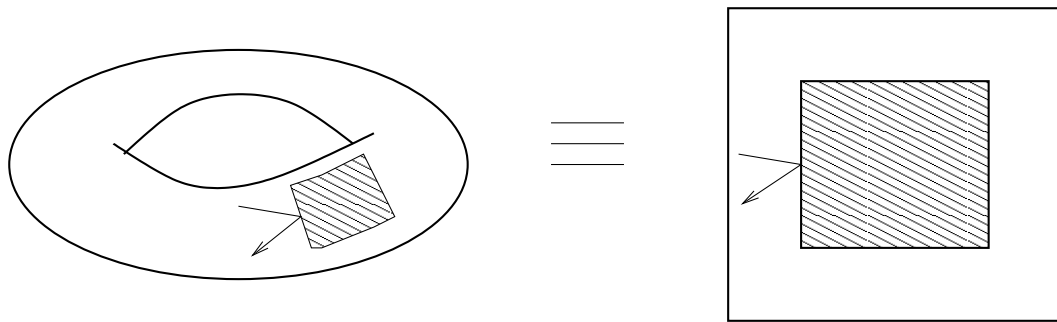


Figura 17: *Representação equivalente do bilhar toros quadrado.*

$p_x^2$  e  $p_y^2$  são conservados nas reflexões com o obstáculo, e por este motivo, o sistema apresenta duas constantes de movimento. O fluxo gerado a partir de  $p_x^2$  e  $p_y^2$  apresenta singularidades nos vértices do obstáculo quadrado [17]. Neste caso, a superfície invariante do fluxo não é necessariamente um toros (que tem número genus  $g = 1$ ), mas pode ser algo topologicamente muito complicado (com  $1 \leq g < \infty$ ) [62]. Para este caso particular a dinâmica do sistema esta confinada a uma superfície que apresenta cinco “buracos” em sua estrutura, ou seja, apresenta genus  $g = 5$ , conforme ilustrado na figura 18.

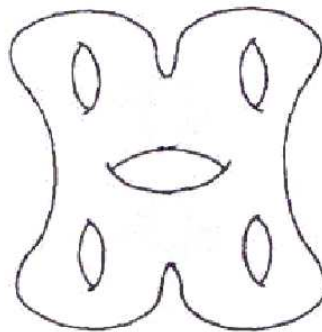


Figura 18: *Superfície invariante no espaço de fases: esfera com cinco buracos (número genus  $g = 5$ ), referente ao bilhar toros quadrado. Figura extraída de [17].*

A pseudo-integrabilidade na maioria dos sistemas de bilhares racionais incorporam a característica de múltiplos buracos nas superfícies construídas no espaço de fases. Isso fundamenta-se nos dois métodos intuitivos baseados na: junção dos bilhares, e singularidades dos campos vetoriais.

## 4.2 Bilhares e Aplicações

A definição de bilhar clássico refere-se a uma partícula ou mais que se movem livremente em um espaço delimitado por paredes rígidas que refletem elasticamente estas partículas [5]. A investigação da origem do movimento caótico em modelos de bilhares desempenham um papel pioneiro muito importante desde o início da *Teoria dos Sistemas Dinâmicos Não-lineares*. Por exemplo, enquanto a origem do caos no bilhar de Sinai [15] está no desajustamento da reflexão no círculo central localizado no seu interior, o bilhar estádio de Bunimovich [16] é caótico devido aos contornos nas duas extremidades do bilhar serem arredondados (semi-círculos) e conectados por linhas retas, conforme a figura 19. Sinai mostrou que a dinâmica apresentada por partículas aprisionadas no bilhar Sinai é ergódica [15, 63] e Bunimovich mostrou que o bilhar estádio de Bunimovich apresenta uma dinâmica caótica [16]. Em bilhares clássicos as trajetórias descritas pela partícula confinada podem ser periódicas ou caóticas, dependendo explicitamente de sua geometria. Sistemas em que muitas partículas interagem, o movimento caótico pode ser gerado por interações mútuas.

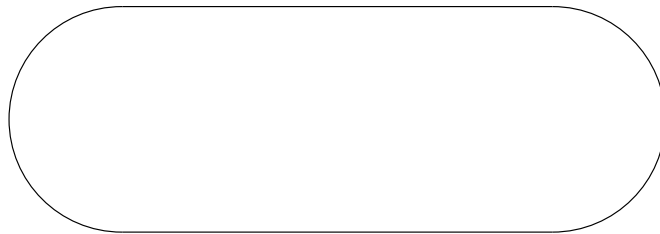


Figura 19: *Bilhar estádio de Bunimovich.*

Na figura 20 apresentamos três bilhares bidimensionais de diferentes geometrias em que uma partícula descreve: (a) órbita periódica; (b)-(c) órbitas caóticas.

Os bilhares circular e elíptico são exemplos de sistemas integráveis. O bilhar Sinai (figura 20-(b)) e o bilhar estádio Bunimovich (figura 19), são exemplos de sistemas caóticos.

Além do estudo clássico dos bilhares, podemos também modelar um sistema composto por partículas interagentes confinadas num bilhar, através de uma abordagem quântica. Um bilhar quântico é descrito pela equação de Schrödinger estacionária com condições periódicas de contorno. McDonald e Kaufman [64] foram os pioneiros no cálculo numérico das autoenergias e autofunções do bilhar estádio de Bunimovich em 1979.

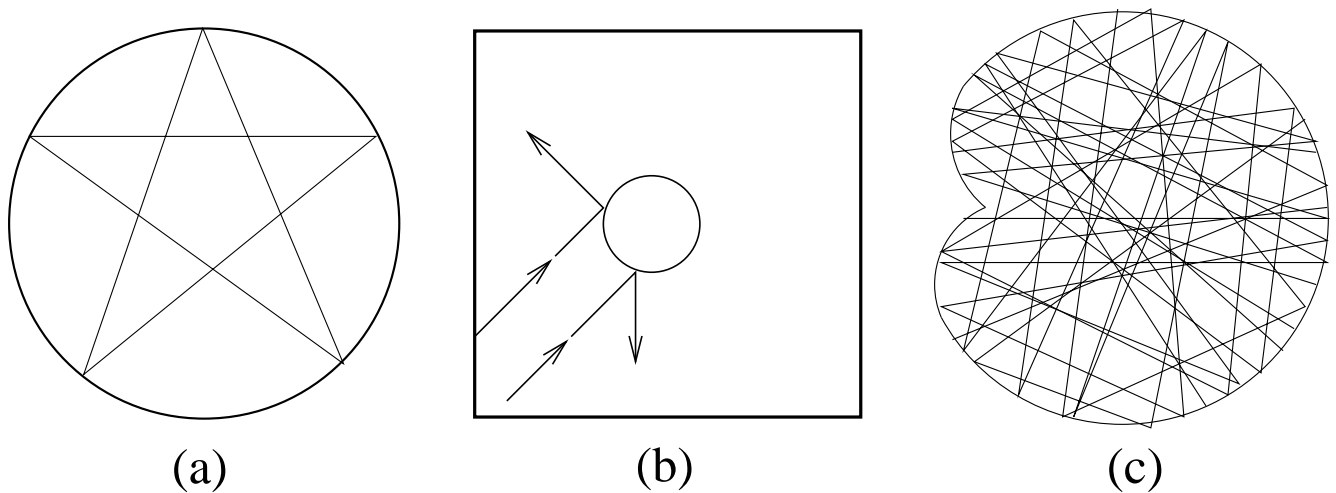


Figura 20: (a) Órbita periódica no bilhar circular. (b)-(c) Órbitas caóticas nos bilhares Sinai e “Pascalian Snail”, respectivamente.

O problema de partículas interagentes em bilhares quânticos, pode ser usado para modelar a dinâmica de elétrons confinados num disco cujo material que constitui o contorno deste disco pode destruir a repulsão Coulombiana entre os elétrons e alterar a massa efetiva entre as partículas [23]. Podemos também encontrar alguns experimentos que apontam a importância de interações elétron-elétron em sistemas mesoscópicos em [65].

Os bilhares poligonais são bons exemplos de sistemas que têm sido estudados clássica e quanticamente por mais de vinte anos [17]. O estudo desta família de bilhares é importante por estarem num limite entre integrabilidade e caos [19]. Em geral os bilhares poligonais são divididos em duas classes: bilhares poligonais racionais, onde todos os ângulos são múltiplos racionais de  $\pi$ , e irracionais, onde todos ou pelo menos um dos ângulos é um múltiplo irracional de  $\pi$  [19]. Um exemplo de bilhares poligonais racionais é o bilhar toros quadrado (figura 17), descrito anteriormente.

No caso dos bilhares poligonais com pelo menos um ângulo irracional, não existem duas constantes de movimento [19]. Sendo ainda que estes sistemas são tipicamente ergódicos [60].

Em 2001, van Vessen *et al.* [66] mostraram que sistemas quânticos, compostos por poucas partículas interagentes, aprisionadas em sistemas unidimensionais, podem apresentar uma distribuição dos níveis de energia que indiquem que seu análogo clássico seja caótico. A condição para que um bilhar quântico unidimensional apresente características caóticas é apresentar uma razão de massas diferente de um. Foram analisadas situações onde as partículas interagem via potenciais de curto alcance, dada por funções  $\delta$ . As condições de contorno utilizadas neste estudo foram as periódicas em forma de anel ou paredes infinitas. A transferência de momento, nos choques da partícula com a parede, é governada pela razão entre as massas das partículas. Esta característica entretanto depende sensivelmente da condição de contorno escolhida.

A descrição e à análise de um sistema composto por partículas aprisionadas em um bilhar

depende sensivelmente da geometria do bilhar. Por este motivo, tais sistemas podem ser modelados de diferentes formas, variando-se o número de partículas e as condições de contornos (geometria do bilhar). Por exemplo: o problema de duas partículas massivas movendo-se sobre uma linha finita, delimitada pelas paredes do bilhar unidimensional, sofrendo colisões elásticas com as paredes e entre si, trata-se de um caso particular do problema referente ao movimento de três partículas sobre um anel [20]. A dinâmica deste problema também pode ser mapeada no movimento de uma partícula confinada num bilhar triangular [67, 68]. A figura 21, ilustra bem esta situação. O eixo das ordenadas representa as coordenadas do centro de massas e o eixo das abscissas corresponde às coordenadas relativas do sistema composto por duas partículas de massas  $m_1$  e  $m_2$ . Se o movimento do sistema ocorrer apenas ao longo do eixo referente às coordenadas do centro de massa, estaremos tratando do caso de movimento unidimensional de duas partículas que colidem frontalmente. Quando uma das partículas estiver em  $R = 0$ , teremos o caso de uma partícula aprisionada em um bilhar triangular (1/4 do losango).

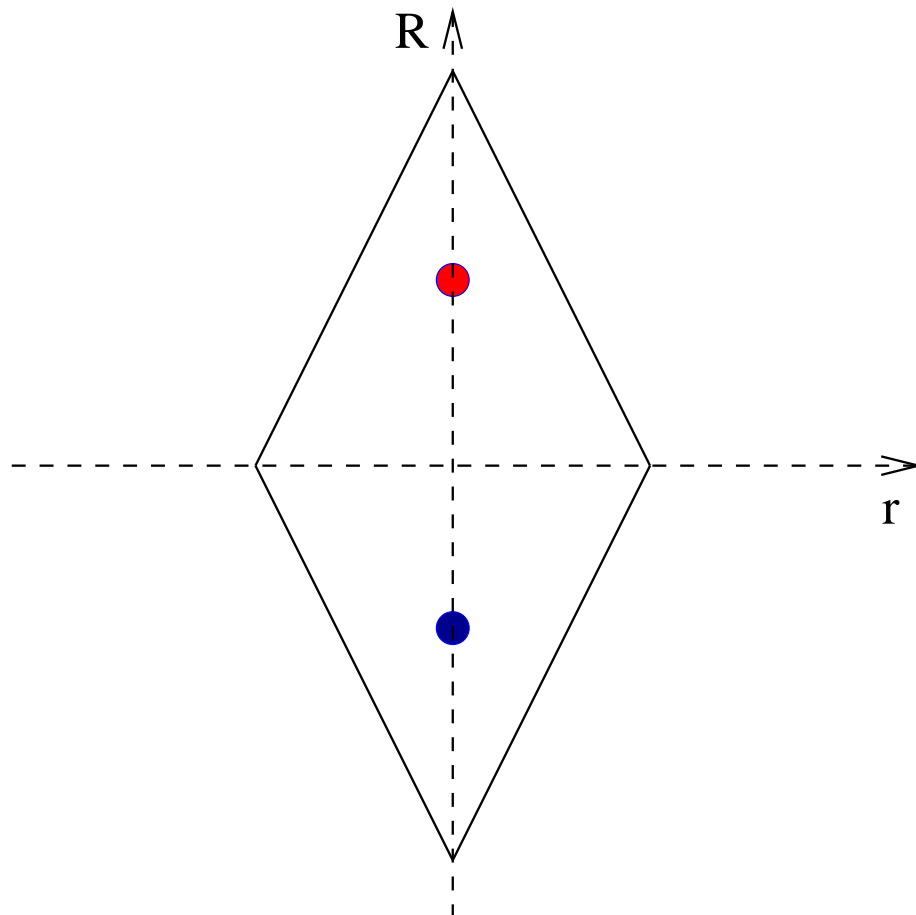


Figura 21: *Representação esquemática de um bilhar bidimensional (com geometria de losango). O eixo das abscissas representa as coordenadas relativas e o eixo das ordenadas as coordenadas do centro de massas.*

Se o movimento das partículas ocorrer ao longo do eixo que representa a coordenada do centro de massa do sistema (sistema unidimensional), entre colisões as velocidades relativa e do centro de

massa serão constantes de movimento. O momento do centro de massa do sistema sofre alterações a cada colisão das partículas com as paredes devido a mudança na simetria translacional do sistema. A regra de atualização nas colisões é determinada pelas leis de conservação da energia cinética e do momento linear. A dinâmica destes sistemas pode ser totalmente monitorada alterando os ângulos do bilhar triangular, que são funções das razões das massas das partículas. Ou seja, se variarmos as massas  $m_1$  e  $m_2$  mapearemos a dinâmica do sistema no espaço de fases. Atualmente os bilhares triangulares têm sido amplamente usados no estudo da difusão de energia em sistemas unidimensionais [69, 70].

No ano de 1997, Lilia Meza-Montes *et al.* [71] apresentaram um estudo referente ao caso de duas partículas de massas iguais ( $m_1 = m_2 = 1$ ) interagindo num bilhar  $N$ -dimensional. Este sistema foi modelado através das coordenadas do centro de massas e coordenadas relativas. Neste caso, a interação entre partículas ocorre devido ao potencial de Coulomb (caso particular do potencial de Yukawa). A partir da Hamiltoniana deste sistema Lilia *et al.* determinaram as equações de movimento que descrevem a dinâmica das partículas no hiper-espaço das coordenadas do centro de massa e relativas, ou seja, construíram o que chamaram “hiper-bilhar”. O caso unidimensional com partículas de massas iguais interagindo via o potencial de Coulomb foi estudado numericamente provando que a dinâmica deste caso particular é caótica.

Em 1976, Casati *et al.* [72] estudaram a distribuição clássica dos vários momentos lineares no problema de duas partículas, consideradas como esferas rígidas aprisionadas, num bilhar unidimensional colidindo frontalmente e com as paredes do bilhar, como função da razão de massas. A razão das massas das partículas determinará se a dinâmica do sistema ocorrerá em uma superfície invariante de número genus  $g = 1$  ou maior. Através de seções de Poincaré Casati *et al.* mostraram que se  $\theta$  for um múltiplo racional de  $\pi$ , da seguinte forma:

$$\theta = \frac{m}{n}\pi, \quad (4.11)$$

com  $m$  e  $n$  inteiros e,

$$\cos(\theta) = \frac{1 - \gamma}{1 + \gamma} \quad (4.12)$$

sendo  $\gamma = m_2/m_1$  a razão entre as massas das partículas, há a quebra de ergodicidade neste sistema, caracterizando a dinâmica não-ergódica. Segundo os resultados apresentados em [72], são possíveis no máximo  $4n$  valores distintos de momentos no espaço de fases.

Embora existam infinitas razões de massas que resultam em valores  $\theta/\pi$  racionais, estamos interessados em dois valores de razões de massas especiais:  $\gamma = 1$  e  $\gamma = 3$  (ou  $1/3$ ). Estes dois valores de  $\gamma$  foram determinados para  $\theta/\pi$  iguais a  $\frac{1}{2}$  e  $\frac{2}{3}$  (ou  $\pi/3$ ), respectivamente. No caso de  $\theta = \frac{2}{3}\pi$ , por exemplo, apenas  $2 \times 3$  valores de velocidades são encontrados, conforme figura 22, sendo que a dinâmica no espaço de fases refere-se ao caso de genus  $g = 1$ , onde a dinâmica é não-ergódica [73].

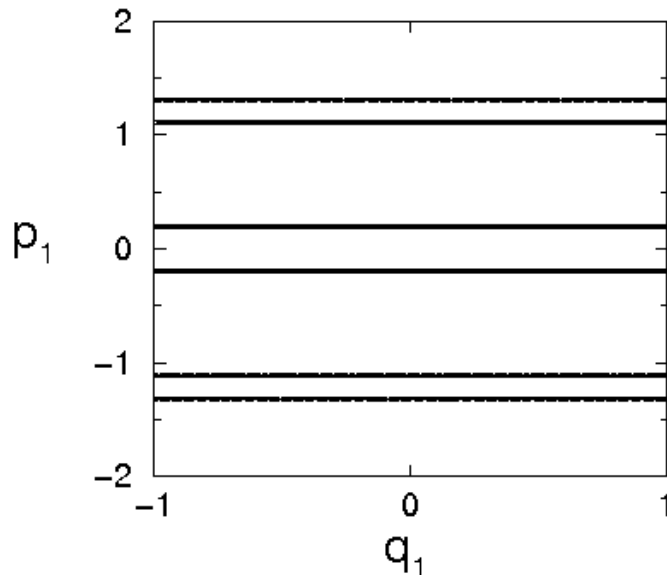


Figura 22: *Seção de Poincaré referente à partícula 1 com  $\theta = \frac{2}{3}\pi$ .*

Por outro lado, se  $\theta$  for um múltiplo irracional de  $\pi$  a densidade dos pares de momentos apresentados são distribuídos uniformemente sobre o espaço dos momentos, caracterizando a dinâmica ergódica [35]. Apesar da dinâmica ser ergódica, o número de momentos no espaço de fases aumenta muito lentamente com a evolução temporal do sistema [74].

Até aqui, na seção referente aos bilhares, introduzimos o conceito de bilhares, expusemos algumas de suas aplicações e fizemos uma breve revisão bibliográfica de alguns trabalhos relevantes para realização deste estudo. A partir de agora vamos descrever um processo que “conecta”, ou melhor, relaciona o problema dos bilhares poligonais (em especial o bilhar triangular) com o estudo desenvolvido por Casati *et al.* [72], discutido anteriormente. Esta análise será importante na discussão dos resultados obtidos em nossa pesquisa. Por meio desta relação será possível identificar sinais de movimento pseudo-integrável (característico de bilhares poligonais racionais) para específicos valores de razões de massas das partículas para o problema referente à duas partículas rígidas aprisionadas num bilhar unidimensional, e colidindo frontalmente. Esta análise será possível devido à discussão feita anteriormente, de acordo com o que foi apresentado em relação a figura 21.

Através dos resultados referentes ao bilhar triangular [19], e ao bilhar poligonal [17,62], constatamos que quando o valor do genus corresponde a  $g = 1$ , o sistema é integrável e o fluxo está confinado na superfície de um toros. Para todos os outros valores do genus ( $1 \leq g < \infty$ ) o sistema é chamado pseudo-integrável [17], e a superfície gerada é topologicamente muito complicada (toros deformado).

Nos bilhares triangulares racionais [figura 16-(a)] os ângulos  $\alpha$  e  $\beta$  podem ser escritos como

função da razão de massas das partículas  $\gamma$  [20]:

$$\tan(\alpha) = \sqrt{\frac{m_2}{m_1}} = \sqrt{\gamma}, \quad (4.13)$$

$$\tan(\beta) = \sqrt{\frac{m_1}{m_2}} = \sqrt{\frac{1}{\gamma}}. \quad (4.14)$$

Devido a esses ângulos serem múltiplos racionais de  $\pi$  podemos reescrever  $\alpha$ , por exemplo, como:

$$\frac{\alpha}{\pi} = \frac{p}{q}. \quad (4.15)$$

É possível relacionar (4.13), para os casos de genus  $g = 1$  e  $g = 2$  (casos integráveis e pseudo-integráveis, respectivamente), com (4.12), para então determinarmos os valores de  $\theta$ , no caso de colisões de partículas rígidas, da seguinte forma: inicialmente, isolamos  $\gamma$  em (4.13),

$$\gamma = [\tan(\alpha)]^2 = \left[ \tan\left(\frac{p}{q}\pi\right) \right]^2, \quad (4.16)$$

então, determinaremos  $\theta$  reescrevendo (4.12), assim:

$$\cos(\theta) = \frac{1 - \gamma}{1 + \gamma}. \quad (4.17)$$

Isolando  $\theta$  na equação (4.17), chegaremos à equação:

$$\theta = \arccos\left(\frac{1 - \gamma}{1 + \gamma}\right). \quad (4.18)$$

Substituindo (4.16) em (4.18), teremos:

$$\theta = \arccos\left\{ \frac{1 - \left[ \tan\left(\frac{p}{q}\pi\right) \right]^2}{1 + \left[ \tan\left(\frac{p}{q}\pi\right) \right]^2} \right\}. \quad (4.19)$$

Agora a partir de (4.17) obteremos uma equação que relaciona  $\gamma$  com  $\theta$  calculado em (4.18). Portanto,  $\gamma$  pode ser determinado por:

$$\gamma = \frac{1 - \cos(\theta)}{1 + \cos(\theta)}. \quad (4.20)$$

As duas primeiras colunas da tabela 1 referem-se aos resultados apresentados por Gorin em [19], sendo que os respectivos valores de  $\frac{p}{q}$  resultam em superfícies invariantes com genus  $g = 1$  ou  $g = 2$ . Portanto, substituindo os valores de  $\frac{p}{q}$  na equação (4.19) determinamos os valores de  $\theta/\pi$  apresentados na terceira coluna da tabela 1. Deste modo, substituindo os valores da  $\theta/\pi$  na equação (4.20), construímos a coluna 4 e obtivemos a coluna 5 da tabela 1, referentes a  $\gamma$  e  $1/\gamma$  (fisicamente equivalentes). Através deste método relacionamos os casos integráveis e pseudo-integráveis na dinâmica do bilhar triangular racional [19], com caso das colisões de partículas

rígidas [72]. Lembrando que os casos referentes a genus  $g = 1$ , correspondem às situações que

genus ( $g$ )	$p/q$	$\theta/\pi$	$\gamma$	$1/\gamma$
1	1/4	1/2	1	1
	1/6	1/3	1/3	3
2	1/5	2/5	0,5278640456	1,894427189 $\sim$ 1,9
	1/8	1/4	0,1715728753	5,828427123
	1/10	1/5	0,1055728090	9,472135955

Tabela 1: *Relação entre os casos integráveis e pseudo-integráveis do bilhar triangular racional com o caso de colisões de partículas rígidas.*

a dinâmica dos bilhares triangulares e das colisões de partículas rígidas é integrável. Quando o genus  $g = 2$ , estaremos tratando dos casos de pseudo-integrabilidade em ambos os problemas.

Analisando a tabela 1, percebemos que o valor de  $\theta = \frac{2}{5}\pi$  quando substituído em (4.18), resulta num valor da razão de massas  $\frac{1}{\gamma} \sim 1,9$ . Chamamos atenção para este valor que corresponde a um caso de pseudo-integrabilidade que será de grande importância na discussão dos resultados, apresentados no Capítulo 5.

### 4.3 Partículas Interagentes num Bilhar 1D

A motivação para o desenvolvimento desta dissertação refere-se ao estudo da dinâmica clássica conservativa de duas partículas interagentes aprisionadas num bilhar unidimensional em função da razão das massas das partículas, conforme ilustrado na figura 23-(a). Fixamos as duas paredes do bilhar na posição  $q = \pm 1$ . Como o movimento das partículas é unidimensional (figura 23-(b)), a partícula 1(2) nunca colidirá com a parede direita (esquerda). Como vimos anteriormente, existem na literatura alguns trabalhos relacionados ao nosso tópico de pesquisa. Além de analisarmos a dinâmica do sistema como função da razão das massas das partículas, estudaremos dois casos particulares relacionados ao alcance de interação entre as partículas:

1. para  $\alpha = 0$ , representando o limite de longo alcance de interação (via potencial de Coulomb - caso particular do potencial de Yukawa);
2. para  $\alpha = 10$ , representado o limite de curto alcance de interação.

A dinâmica de partículas interagentes em bilhares unidimensionais é caótica em determinadas circunstâncias. Um caso onde o movimento deste tipo de sistema é caótico ocorre quando, além das partículas colidirem frontalmente e com as paredes do bilhar, elas interagem devido a uma força de atração ou repulsão. Em nosso modelo, a responsável por essa interação é a força de



Yukawa. Deste modo, estamos interessados em analisar estas circunstâncias para entender melhor a origem do movimento caótico das partículas.

Uma possível forma de determinar se um sistema clássico é caótico ocorre através do cálculo dos expoentes de Lyapunov. Baseados neste método descreveremos a dinâmica deste sistema no espaço tangente com o intuito de calcular o espectro dos expoentes de Lyapunov analiticamente. Através da distribuição dos expoentes de Lyapunov a tempo finito, calculados numericamente, esperamos obter alguma informação relevante da dinâmica deste sistema.

Por conveniência descreveremos nosso sistema através de coordenadas do centro de massa e de coordenadas relativas, sendo que

$$R = \frac{(m_1 q_1 + m_2 q_2)}{m_1 + m_2}, \quad \text{onde } M = m_1 + m_2 \text{ é a massa total,} \quad (4.21)$$

$$r = q_1 - q_2, \quad (4.22)$$

onde a massa reduzida é dada por:

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}. \quad (4.23)$$

Como este sistema, composto por duas partículas, é descrito em termos das coordenadas do centro

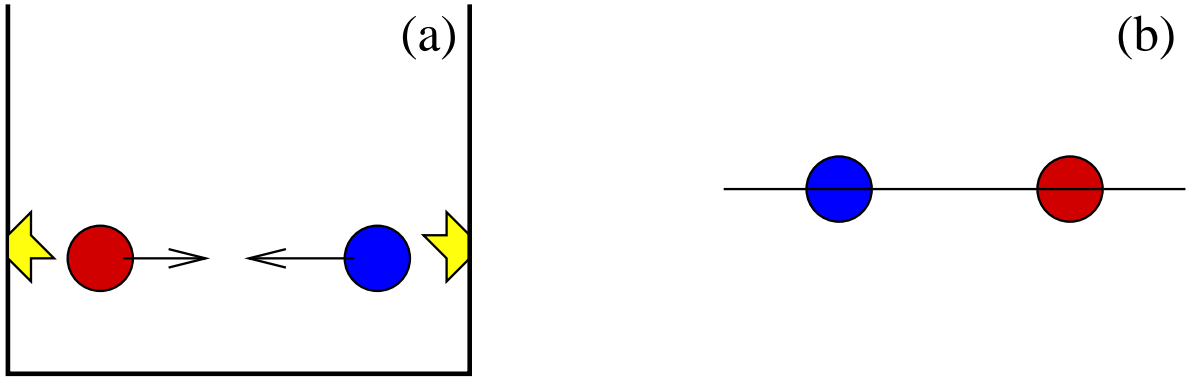


Figura 23: (a) Representação esquemática do exemplo físico que serve de tema desta dissertação; (b) Configuração do movimento unidimensional das partículas que colidem frontalmente.

de massa e coordenadas relativas, em determinadas situações vamos nos referir à dinâmica de *uma partícula* no espaço  $(r, R)$ , em vez de analisarmos cada partícula individualmente. Entretanto, as colisões da *partícula* com as paredes do bilhar correspondem às colisões das partículas reais. A descrição de um sistema composto por poucas partículas em termos de *uma partícula* num hiperespaço foi utilizada em vários casos, inclusive em bilhares [73, 75]. Esta notação será de grande utilidade no Capítulo 5.

A Hamiltoniana deste modelo, em função das coordenadas do centro de massa e coordenadas relativas, é:

$$H = \frac{P^2}{2M} + \frac{p^2}{2\mu} + V(r), \quad (4.24)$$

onde

$$V(r) = V_0 \frac{e^{-\alpha r}}{r}. \quad (4.25)$$

é o potencial de Yukawa.

Após as colisões nas coordenadas  $(r_n, R_n)$  a *partícula* descreve uma trajetória, em geral, indo em direção a uma das paredes, sob a ação do potencial no espaço de fases. O quão próximo da parede a *partícula* chegar dependerá da energia associada com o movimento relativo na trajetória.

A motivação física considerada na escolha do potencial de Yukawa vem, entre outros fatores, da possibilidade de variarmos o alcance de interação entre as partículas através do parâmetro  $\alpha$ . Além de podermos variar a intensidade de interação por meio da constante  $V_0$ . Um exemplo de aplicação deste potencial modelando interações entre elétrons confinados num bilhar quadrado sujeitos a um campo magnético ortogonal pode ser encontrado na seguinte referência [76]. Outro exemplo de aplicação do potencial de Yukawa consiste no problema de duas partículas quânticas aprisionadas em um bilhar circular, sujeitas a um fraco campo magnético constante [77].

Quando considerarmos a interação entre partículas via força de Yukawa, analisaremos numericamente a dinâmica do sistema em dois casos. No primeiro caso faremos  $\alpha = 0$ , recaindo num caso particular do potencial de Yukawa, o potencial de Coulomb. O segundo caso, refere-se a fixarmos  $\alpha = 10$ , e então faremos uma comparação com o primeiro caso.

## 5 *Resultados e Discussões*

*Inicialmente apresentaremos algumas deduções referentes ao cálculo analítico do espectro dos expoentes de Lyapunov, para o sistema de duas partículas rígidas aprisionadas num bilhar unidimensional, interagindo através de colisões frontais. Os resultados obtidos fornecerão informações sobre a dinâmica do sistema estudado. Terminadas estas deduções calcularemos o espectro dos expoentes de Lyapunov com o auxílio da extensão do algoritmo de Benettin. Em seguida, analisaremos a influência da interação entre as partículas devido ao potencial de Yukawa, no cálculo analítico do espectro dos expoentes de Lyapunov deste sistema. Concluída a primeira parte deste Capítulo, interpretaremos os resultados numéricos obtidos para o caso das partículas interagindo via potencial de Yukawa. Em especial, estamos interessados no estudo numérico da distribuição dos expoentes de Lyapunov a tempo-finito  $P(\Lambda_t, \gamma)$  como função da razão de massas das partículas. Determinamos uma relação entre a distribuição do expoentes de Lyapunov de maior probabilidade de ocorrência  $P_\Lambda(\gamma)$ , com as propriedades dinâmicas do sistema no espaço de fases.*

### 5.1 Resultados Analíticos

Nosso objetivo inicialmente é descrever a dinâmica de duas partículas rígidas interagentes aprisionadas num bilhar unidimensional. Na primeira parte dos resultados analíticos descreveremos a dinâmica das interações entre as partículas através de colisões frontais. Na segunda parte introduziremos o potencial de Yukawa no sistema e então faremos as mesmas análises da primeira parte dos resultados. Estas descrições tem o objetivo de obter as ferramentas necessárias para o cálculo analítico do espectro dos expoentes de Lyapunov de acordo com a generalização do algoritmo de Benettin *et al.* [28] feita por Dellago *et al.* [29].

#### 5.1.1 Duas Partículas Interagentes num Bilhar 1D

Para simplificarmos nossos cálculos descreveremos a dinâmica de nosso sistema através de coordenadas do centro de massa e coordenadas relativas, conforme descrito detalhadamente no

Capítulo 2. As posições do centro de massa e relativa do sistema são respectivamente:

$$R = \frac{(m_1 q_1 + m_2 q_2)}{m_1 + m_2}, \quad \text{onde } M = m_1 + m_2 \text{ é a massa total,} \quad (5.1)$$

$$r = q_1 - q_2, \quad (5.2)$$

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}, \quad \text{sendo } \mu \text{ a massa reduzida.} \quad (5.3)$$

Através das equações (5.1) e (5.2) determinamos as velocidades do centro de massa e relativa, que podem ser escritas respectivamente como:

$$V = \frac{m_1 v_1 + m_2 v_2}{m_1 + m_2}, \quad (5.4)$$

$$v = v_1 - v_2. \quad (5.5)$$

Como vimos no Capítulo 4, o problema do movimento de duas partículas rígidas ao longo de uma linha finita, sofrendo impactos com as paredes do bilhar unidimensional e entre si, pode ser transformado no movimento de uma “*partícula*” movendo-se em um bilhar triangular [71]. As coordenadas da “*partícula*” neste bilhar são as coordenadas do centro de massa e relativas do sistema. Neste caso, a dinâmica da *partícula* ocorre num hiper-espaço  $(r, R)$  [71], criando um hiper-bilhar [73, 75]. Geralmente, o hiper-espaço é construído sem a necessidade de introduzirmos uma transformação de coordenadas [71].

Entre colisões, o momento do centro de massa e momento relativo são constantes de movimento. A *partícula* move-se livremente entre colisões e os pontos do espaço de fases  $\Gamma_i = [r^i(t), R^i(t), v^i(t), V^i(t)]$  para diferentes instantes de tempo  $i$  estão relacionadas por:

$$\Gamma_{i+1} = D(t_{i+1} - t_i) \Gamma_i, \quad (5.6)$$

que pode ser escrito matricialmente como,

$$\underbrace{\begin{pmatrix} r(t_{i+1}) \\ R(t_{i+1}) \\ v(t_{i+1}) \\ V(t_{i+1}) \end{pmatrix}}_{\Gamma_{i+1}} = \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 & (t_{i+1} - t_i) & 0 \\ 0 & 1 & 0 & (t_{i+1} - t_i) \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}}_{D(t_{i+1} - t_i)} \underbrace{\begin{pmatrix} r(t_i) \\ R(t_i) \\ v(t_i) \\ V(t_i) \end{pmatrix}}_{\Gamma_i}, \quad (5.7)$$

ou ainda como,

$$\begin{aligned} r(t_{i+1}) &= r(t_i) + v(t_i)(t_{i+1} - t_i), \\ R(t_{i+1}) &= R(t_i) + V(t_i)(t_{i+1} - t_i), \\ v(t_{i+1}) &= v(t_i), \\ V(t_{i+1}) &= V(t_i). \end{aligned} \quad (5.8)$$

A matriz  $D(t_{i+1} - t_i)$  muda nas colisões entre partículas e nas colisões das partículas com as paredes (esquerda e direita). Nas coordenadas do centro de massa as colisões entre partículas (em  $r = 0$ ) são muito simples e apenas o momento relativo da *partícula* muda de sinal. Deste modo, no momento das colisões entre partículas a matriz  $D(t_{i+1} - t_i)$ , neste caso chamada  $E(t_{i+1} - t_i)$ , pode ser reescrita como:

$$\underbrace{\begin{pmatrix} r(t_{i+1}) \\ R(t_{i+1}) \\ v(t_{i+1}) \\ V(t_{i+1}) \end{pmatrix}}_{\Gamma_{i+1}} = \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 & (t_{i+1} - t_i) & 0 \\ 0 & 1 & 0 & (t_{i+1} - t_i) \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}}_{E(t_{i+1} - t_i)} \underbrace{\begin{pmatrix} r(t_i) \\ R(t_i) \\ v(t_i) \\ V(t_i) \end{pmatrix}}_{\Gamma_i}, \quad (5.9)$$

ou ainda na forma de um conjunto de equações,

$$\begin{aligned} r(t_{i+1}) &= r(t_i) + v(t_i)(t_{i+1} - t_i), \\ R(t_{i+1}) &= R(t_i) + V(t_i)(t_{i+1} - t_i), \\ v(t_{i+1}) &= -v(t_i), \\ V(t_{i+1}) &= V(t_i). \end{aligned} \quad (5.10)$$

As colisões com as paredes da esquerda e da direita causam mudanças na simetria translacional do sistema, e conseqüentemente os momentos do centro de massa e relativo não são mais constantes de movimento. O efeito das colisões da *partícula* com as paredes altera continuamente os ponto imediatamente antes e depois das colisões no espaço de fases. Com isso a partir de agora vamos descrever as transformações necessárias no instante das colisões.

Admitimos que a partícula 1 colide com a parede da esquerda e a partícula 2 com a parede da direita. Imediatamente após as colisões da partícula 1 com a parede da esquerda a velocidade relativa da *partícula*, em termos da velocidade inicial das partículas 1 e 2, é:

$$v^f = v_1^f - v_2^f = -v_1^i - v_2^i, \quad (5.11)$$

onde os índices  $i$  e  $f$  representam as velocidades imediatamente antes e depois de cada colisão. Fazendo a mesma análise para a partícula 2, apenas lembrando que ela colide com a parede da direita, também podemos escrever a velocidade relativa da *partícula* em termos da velocidade inicial das partículas 1 e 2, sendo que:

$$v^f = v_1^f - v_2^f = v_1^i + v_2^i. \quad (5.12)$$

Como as partículas colidem frontalmente, num sistema unidimensional, elas não podem passar para o lado oposto ao que se encontram, por exemplo, como a partícula 1 colide com a parede da esquerda ela nunca poderá colidir com a parede da direita.

Através das relações entre as velocidades das partículas 1 e 2 apresentadas anteriormente poderemos deduzir uma equação semelhante à matriz  $D(t_{i+1} - t_i)$  para o caso das colisões das partículas com as respectivas paredes. É importante chamar a atenção, que esta dedução será feita apenas para a partícula 2 que colide com a parede da direita, e ao final do cálculo, apontaremos o caminho a ser seguido para o caso da partícula 1. Para isso, devemos partir da lei de conservação do momento aplicado ao sistema imediatamente após a primeira colisão entre as partículas e com as paredes, e da velocidade relativa da *partícula* antes da primeira colisão. Então temos que:

$$MV = m_1v_1 + m_2v_2, \quad \text{colisão entre partículas } (r = 0), \quad (5.13)$$

$$MV = m_1v_1 - m_2v_2, \quad \text{após a primeira colisão da partícula 2 com parede,} \quad (5.14)$$

$$v = v_1 - v_2, \quad \text{velocidade relativa da } \textit{partícula} \text{ antes da primeira colisão.} \quad (5.15)$$

A equação (5.13) refere-se à lei de conservação do momento na colisão entre as duas partículas em  $r = 0$  (parede fictícia). Para a equação (5.14) usamos a lei de conservação de momento na colisão da partícula 2, com a parede da direita. Por sua vez a equação (5.15) refere-se à velocidade relativa da *partícula* em termos da velocidade de cada partícula.

A diferença básica na determinação da matriz  $D(t_{i+1} - t_i)$  para a partícula 1 em relação a partícula 2 está em fazermos uma mudança de sinais nas equações que representam a lei de conservação de momento, imediatamente após a colisão da partícula 1 com a parede da esquerda. Deste modo, as equações referentes às colisões entre partículas, às colisões da partícula 1 com a parede da esquerda e à velocidade relativa da *partícula*, são respectivamente:

$$MV = m_1v_1 + m_2v_2, \quad \text{colisão entre partículas } (r = 0),$$

$$MV = -m_1v_1 + m_2v_2, \quad \text{após a primeira colisão da partícula 1 com parede,} \quad (5.16)$$

$$v = v_1 - v_2, \quad \text{velocidade relativa da } \textit{partícula} \text{ antes da primeira colisão,}$$

onde o restante do procedimento é análogo ao que faremos a partir de agora apenas para partícula 2.

Inicialmente devemos isolar  $v_2$  e  $v_1$  nas equações (5.13) e (5.15) para chegarmos a duas expressões de forma:

$$v_2 = \frac{MV}{m_2} - \frac{m_1}{m_2}v_1, \quad (5.17)$$

$$v_1 = v + v_2. \quad (5.18)$$

Substituindo (5.18) em (5.17) teremos que:

$$\begin{aligned} v_2 &= \frac{MV}{m_2} - \frac{m_1}{m_2}(v + v_2), \\ v_2 &= V - \frac{m_1}{M}v, \end{aligned} \quad (5.19)$$

lembrando que  $M = m_1 + m_2$ . Substituindo (5.19) em (5.18) poderemos encontrar uma expressão para  $v_1$ :

$$\begin{aligned} v_1 &= v + v_2, \\ v_1 &= V + \frac{m_2}{M}v. \end{aligned} \quad (5.20)$$

Portanto, acabamos de determinar duas expressões para as velocidades  $v_1$  e  $v_2$ , imediatamente antes da primeira colisão da partícula 2 com a parede da direita e da colisão entre partículas, em função das coordenadas do centro de massa e relativas e das massas das partículas.

Agora, substituindo as equações (5.19) e (5.20) na equação (5.12), teremos:

$$\begin{aligned} v^f &= v_1^i + v_2^i, \\ v^f &= -\kappa v^i + 2V^i, \end{aligned} \quad (5.21)$$

onde  $\kappa = (m_1 - m_2)/M$ .

A velocidade do centro de massa do sistema imediatamente após a colisão da partícula 2 com a parede da direita pode ser determinada substituindo as equações (5.20) e (5.19) na equação (5.14), dada por:

$$MV^f = m_1 v_1^f - m_2 v_2^f, \quad (5.22)$$

resultando uma expressão da forma:

$$V^f = \frac{2\mu}{M}v^i + \kappa V^i. \quad (5.23)$$

Desta forma, determinamos a velocidade relativa e a velocidade do centro de massa em relação ao movimento da partícula 2. O procedimento para deduzirmos estas grandezas em relação ao movimento da partícula 1 é o mesmo, salvo as alterações realizadas nas equações (5.16).

Como citamos anteriormente, o efeito das colisões da *partícula* com as paredes da esquerda e da direita causam seguidas mudanças nos pontos do espaço de fases  $\Gamma_i$  antes das colisões, e  $\Gamma_f$  depois das colisões, sendo que a conexão entre os pontos  $\Gamma_i$  e  $\Gamma_f$  é dada por:

$$\Gamma_f = D_j \Gamma_i, \quad (5.24)$$

onde

$$D_j = (-1)^j \begin{pmatrix} (-1)^j & 0 & 0 & 0 \\ 0 & (-1)^j & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\kappa & 2 \\ 0 & 0 & 2\frac{\mu}{M} & \kappa \end{pmatrix}. \quad (5.25)$$

O índice  $j = 1(2)$  é usado para distinguir a partícula  $1(2)$ , lembrando que as partículas 1 e 2 nunca colidem com as paredes da direita e da esquerda, respectivamente.

A equação (5.24) é de fundamental importância na construção do movimento das duas partículas aprisionadas no bilhar unidimensional. Conseqüentemente, construímos a primeira ferramenta necessária para quantificarmos o quão caótico é o sistema, se assim o for.

### 5.1.1.1 Cálculo do Expoente de Lyapunov

Como citamos anteriormente, o cálculo analítico do espectro dos expoentes de Lyapunov de nosso sistema poderá ser feito através do algoritmo de Benettin *et al.* [28], adaptado por Delgado *et al.* [29]. O próximo passo deste procedimento será determinar o restante das ferramentas necessárias para isto, baseados no Capítulo 3.

Através da equação (5.24) podemos construir a trajetória principal no espaço de fases de acordo com a definição de expoente de Lyapunov. Inicialmente teremos que determinar uma diferença infinitesimal de caminho em relação a uma segunda trajetória chamada trajetória satélite no espaço tangente. Então, adicionando uma diferença de caminho infinitesimal à trajetória principal, chegaremos a uma expressão que possibilitará a construção da trajetória satélite no espaço tangente, na forma:

$$\delta\Gamma(t) = M(t)\delta\Gamma(t_0), \quad (5.26)$$

onde  $M(t)$  é chamada matriz monodrômica, que pode ser escrita como,

$$M(t) = \frac{d\Gamma(t)}{d\Gamma(t_0)}. \quad (5.27)$$

É importante lembrar que os expoentes de Lyapunov quantificam as taxas médias de esticamento ou contração das diferenças infinitesimais entre a trajetória principal e a trajetória satélite, que na verdade, são determinadas através dos autovetores de  $M$ . Portanto, os expoentes de Lyapunov podem ser calculados com o auxílio da seguinte equação:

$$\lambda_i = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\log \mu_i(t)}{t}, \quad (5.28)$$

sendo que  $\mu_i(t)$  é o  $i$ -ésimo autovalor de  $M$ . Existe um expoente de Lyapunov associado a cada uma das dimensões do espaço de fases. A matriz  $M$  pode ser escrita como um produto de matrizes para pequenos intervalos de tempo. Durante o movimento livre entre colisões, a dinâmica no espaço tangente é similar a dinâmica no espaço de fases. A perturbação na posição cresce linearmente com a perturbação na velocidade, enquanto a perturbação na velocidade permanece constante. Para este tipo de dinâmica a matriz monodrômica (5.27), é dada por:

$$M = D(t_{i+1} - t_i). \quad (5.29)$$



Deste modo, a matriz (5.29) descreve o movimento livre da *partícula* (entre colisões). Esta matriz tem autovalores  $|\lambda| = 1$ , o que fica evidente pelo fato de  $D(t_{i+1} - t_i)$  ser escrita na forma triangular superior e apresentar todos os elementos da diagonal principal iguais a 1.

A situação muda drasticamente nas colisões da *partícula* com as paredes. Com o auxílio do algoritmo desenvolvido por Dellago *et al.* [29] (apresentado no Capítulo 3), será possível formular as equações necessárias para descrever a dinâmica do sistema no espaço tangente. Neste caso, partimos da seguinte equação:

$$\delta\Gamma_f = \frac{\partial C}{\partial \Gamma} \delta\Gamma_i + \left\{ \frac{\partial C}{\partial \Gamma} F(\Gamma_i) - F[C(\Gamma_i)] \right\} \delta\tau_f. \quad (5.30)$$

A função  $F(\Gamma_i)$ , em nosso problema, é dada por:

$$F(\Gamma) = \dot{\Gamma} = (\dot{r}, \dot{R}, \dot{v}, \dot{V}), \quad (5.31)$$

representando as equações de movimento, para o movimento livre entre colisões. Como a velocidade relativa da partícula entre colisões é constante, podemos reescrever (5.31) como:

$$F(\Gamma) = \dot{\Gamma} = (v, V, 0, 0). \quad (5.32)$$

A equação,

$$C = D_j \Gamma_i, \quad (5.33)$$

é responsável pela transformação no momento das colisões da *partícula* com as paredes onde  $D_j$  é dada por (5.25). O termo  $\delta\tau_f$  corresponde ao tempo de atraso nas colisões da trajetória satélite em relação ao instante de colisão da trajetória principal. Entre o instante de colisão da trajetória principal e o instante de colisão da trajetória satélite, a *partícula* move-se livremente. Desta forma, o tempo de atraso para partícula 1(2) é determinado conforme [29]:

$$\delta\tau_f = -\frac{\delta q_{1(2)}^i}{v_{1(2)}^i}. \quad (5.34)$$

As velocidades das partículas 1(2) são:

$$v_{1(2)} = V - (-1)^j \frac{m_{2(1)}}{M} r, \quad (5.35)$$

e a evolução espacial da trajetória satélite é dada por:

$$\delta q_{1(2)} = \delta R - (-1)^j \frac{m_{2(1)}}{M} \delta r. \quad (5.36)$$

Portanto, substituindo (5.35) e (5.36) em (5.34), chegaremos a uma expressão para  $\delta\tau_f$ , para

ambas as partículas:

$$\begin{aligned}\delta\tau_f &= -\frac{\delta q_{1(2)}^i}{v_{1(2)}^i} \\ \delta\tau_f &= -\frac{M\delta R^i - (-1)^{1(2)}m_{2(1)}\delta r^i}{MV^i - (-1)^{1(2)}m_{2(1)}v^i}.\end{aligned}\quad (5.37)$$

De posse das equações (5.25), (5.37) e (5.30), poderemos construir a matriz monodrômica  $M_2$  que relaciona  $\delta\Gamma_f$  e  $\delta\Gamma_i$  nas colisões da *partícula* com a parede da direita ( $j = 2$ ), em relação a partícula 2. Ao final generalizaremos o resultado obtido para a partícula 1. De modo geral, a conexão entre  $\delta\Gamma_f$  e  $\delta\Gamma_i$  dada pela matriz monodrômica pode escrita assim:

$$\delta\Gamma_f = M_j\delta\Gamma_i. \quad (5.38)$$

Substituindo (5.25) em (5.30), teremos:

$$F(\Gamma_i) = \begin{pmatrix} v^i \\ V^i \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (5.39)$$

e

$$F[C(\Gamma_i)] = \begin{pmatrix} -\kappa v^i + 2V^i \\ \frac{2\mu}{M}v^i + \kappa V^i \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (5.40)$$

Agora, utilizando a equação (5.30) reescrita abaixo:

$$\delta\Gamma_f = \frac{\partial C}{\partial \Gamma}\delta\Gamma_i + \left\{ \frac{\partial C}{\partial \Gamma}F(\Gamma_i) - F[C(\Gamma_i)] \right\} \delta\tau_f, \quad (5.41)$$

teremos:

$$\delta\Gamma_f = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\kappa & 2 \\ 0 & 0 & \frac{2\mu}{M} & \kappa \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta r^i \\ \delta R^i \\ \delta v^i \\ \delta V^i \end{pmatrix} + \left[ \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\kappa & 2 \\ 0 & 0 & \frac{2\mu}{M} & \kappa \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v^i \\ V^i \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} -\kappa v^i + 2V^i \\ \frac{2\mu}{M}v^i + \kappa V^i \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \right] \delta\tau_f, \quad (5.42)$$

sendo que a (5.42) pode ser reescrita na forma de um conjunto de equações, da forma:

$$\delta r^f = \delta r^i + (v^i + \kappa v^i - 2V^i) \delta\tau_f, \quad (5.43)$$

$$\delta R^f = \delta R^i + \left( V^i - \frac{2\mu}{M}v^i + \kappa V^i \right) \delta\tau_f, \quad (5.44)$$

$$\delta v^f = -\kappa\delta v^i + 2\delta V^i, \quad (5.45)$$

$$\delta V^f = \frac{2\mu}{M}\delta v^i + \kappa\delta V^i. \quad (5.46)$$

Agora, substituindo o tempo de atraso (5.37) em (5.43) e (5.44) determinaremos o conjunto de equações:

$$\delta r^f = -\kappa\delta r^i + 2\delta R^i, \quad (5.47)$$

$$\delta R^f = \frac{2\mu}{M}\delta r^i + \kappa\delta R^i, \quad (5.48)$$

$$\delta v^f = -\kappa\delta v^i + 2\delta V^i, \quad (5.49)$$

$$\delta V^f = \frac{2\mu}{M}\delta v^i + \kappa\delta V^i, \quad (5.50)$$

através do qual obtemos a matriz monodrômica para a partícula 2, dada por:

$$M_2 = \begin{pmatrix} -\kappa & 2 & 0 & 0 \\ \frac{2\mu}{M} & \kappa & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\kappa & 2 \\ 0 & 0 & \frac{2\mu}{M} & \kappa \end{pmatrix}. \quad (5.51)$$

Portanto, agora estenderemos o resultado (5.51) para as colisões da *partícula* em relação a partícula 1 com a parede da esquerda, para então, escrevermos a matriz monodrômica genérica do sistema. Então, para a partícula 1, temos:

$$M_1 = \begin{pmatrix} \kappa & -2 & 0 & 0 \\ -\frac{2\mu}{M} & -\kappa & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \kappa & -2 \\ 0 & 0 & -\frac{2\mu}{M} & -\kappa \end{pmatrix}. \quad (5.52)$$

Deste modo, a matriz monodrômica que conecta os pontos do espaço tangente imediatamente antes e imediatamente depois das colisões da *partícula* com as paredes do bilhar, é a seguinte:

$$M_j = (-1)^j \begin{pmatrix} -\kappa & 2 & 0 & 0 \\ \frac{2\mu}{M} & \kappa & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\kappa & 2 \\ 0 & 0 & \frac{2\mu}{M} & \kappa \end{pmatrix}, \quad (5.53)$$

lembrando que  $j = 1(2)$ , refere-se a partícula 1(2).

A matriz (5.53), que tem forma de bloco diagonal, tem autovalores  $|\lambda| = 1$ , que não é evidente, porém fácil de verificar. Através das equações (5.53) e (5.29), poderemos determinar (5.27) para uma dada trajetória, sendo possível então, analisar a dinâmica no espaço de tangente. Deste modo, através do produto das matrizes (5.29) e (5.53), considerando que a *partícula* esteja indo em direção a parede da direita, podemos exemplificar de forma simples a construção de uma

trajetória no espaço tangente, da seguinte forma:

$$M = M(t - t_p) \dots M_2 M(t_3 - t_2) \cdot M_1 M(t_2 - t_1) \cdot M_2 M(t_1 - t_0), \quad (5.54)$$

onde entre os tempos  $t_{i+1} - t_i$  com  $i = 0, 1, \dots$ , a *partícula* move-se livremente. E as matrizes  $M_{1(2)}$  são responsáveis pelas transformações no momento das colisões da partícula 1(2), com a parede da esquerda(direita). O lado direito da equação (5.54) pode ser representado por:

$$M(\Delta t, j) = M(\Delta t) M_j, \quad (5.55)$$

cujos módulos dos autovalores são  $|\lambda| = 1$ , reforçando o fato de que as colisões não alteram o caráter regular do movimento da *partícula*. Portanto, a matriz monodrômica de uma dada trajetória pode ser escrita na forma:

$$M = \prod_k M(\Delta t_k, \kappa_k), \quad (5.56)$$

sendo que autovalores também são iguais a  $|\lambda| = 1$ . Este resultado é válido para qualquer combinação do produto das matrizes (5.29) e (5.53), ou seja, para qualquer trajetória. Desta forma, os autovalores continuam sendo iguais a um após grandes intervalos de tempo e por isso muitas colisões. Conseqüentemente, os expoentes de Lyapunov calculados através da equação (5.28) por um tempo  $t \rightarrow \infty$ , serão iguais a zero independente do valor da razão das massas das partículas.

Quando introduzimos entre as partículas uma interação suave a dinâmica muda drasticamente e como conseqüentemente os expoentes de Lyapunov gerados serão positivos, conforme veremos a seguir.

### 5.1.2 Duas Partículas num Bilhar 1D Interagindo via Potencial de Yukawa

O exemplo físico que motivou a nossa pesquisa foi apresentado no Capítulo 2. Entretanto, para fins de facilitar a visualização do problema proposto faremos uma breve revisão.

A partir de agora além da interação das partículas através de colisões, acrescentaremos a este sistema uma interação adicional: dada pelo potencial de Yukawa. Deste modo, nosso principal objetivo será analisar o efeito do potencial suave sobre a dinâmica do sistema apresentado, de acordo com a seção anterior. A Hamiltoniana para este modelo em função das coordenadas do centro de massa e coordenadas relativas é dada por:

$$H = \frac{P^2}{2M} + \frac{p^2}{2\mu} + V(r), \quad (5.57)$$

onde

$$V(r) = V_0 \frac{e^{-\alpha r}}{r}, \quad (5.58)$$

sendo que  $V(r)$  é o potencial de Yukawa, e  $r = |q_1 - q_2|$  é distância relativa entre as partículas. Neste caso, o movimento relativo da *partícula* está sujeito a força  $\partial V/\partial r$ , enquanto o movimento de seu centro de massa está livre, entre colisões. Um estudo similar foi realizado por Lilia *et al.* [71] para o caso de razões de massas das partículas iguais, mostrando que a dinâmica deste sistema é caótica. Através da Hamiltoniana (5.57) podemos determinar as equações de movimento de Hamilton, como sendo:

$$\dot{r} = p/\mu \quad \dot{R} = P/M \quad \dot{p} = -\frac{\partial V}{\partial r} \quad \dot{P} = 0. \quad (5.59)$$

As equações (5.59) indicam que entre colisões a *partícula* move-se livremente de acordo com as coordenadas do centro de massa, enquanto que a força central  $V(r)$  age somente na coordenada relativa. Os movimentos são independentes, e tornam-se somente correlacionados no instante de cada colisão, onde os correspondentes momentos mudam, enquanto a energia total do sistema mantém-se constante.

Se fizermos  $\alpha = 0$  na equação (5.58), encontramos um caso particular do potencial de Yukawa; o potencial de Coulomb, dado por:

$$V(r) = V_0 \frac{1}{r}. \quad (5.60)$$

Anteriormente vimos que, se o movimento de um dado sistema é caótico, então os valores dos expoentes de Lyapunov são positivos. Os expoentes de Lyapunov são determinados através da descrição da dinâmica do sistema no espaço tangente onde o efeito da força de Yukawa dada por

$$Q(r) = -\frac{\partial V}{\partial r}, \quad (5.61)$$

tem que ser considerado, e por este motivo será incorporado à equação (5.32). Deste modo, podemos reescrever (5.32) como:

$$F(\Gamma) = [\dot{r}, \dot{R}, \dot{v}, \dot{V}] = [v, V, Q(r), 0]. \quad (5.62)$$

Nesta nova abordagem devemos considerar também a influência da força de Yukawa no cálculo do tempo de atraso  $\delta\tau_f$ . Portanto, é necessário calcular o efeito das reflexões da partícula 1(2) sob o tempo de atraso expresso em termos das coordenadas relativas e do centro de massa. Neste caso, o tempo de atraso é determinado da seguinte forma:

$$t_j = \frac{\partial S_j}{\partial E} = m_j \int_{q_j^0}^{q_j^n} \frac{\partial \dot{q}_j}{\partial E} dq_j = \int_{q_j^0}^{q_j^n} \frac{dq_j}{\dot{q}_j}. \quad (5.63)$$

Os limites de integração de (5.63) resultam em  $\delta q_j = q_j^0 - q_j^n$ , onde  $q_j^0$  é a posição da trajetória satélite quando a trajetória principal colide com a parede e,  $q_j^n$  é o ponto de colisão da trajetória

satélite. Em coordenadas relativas, a equação (5.63) pode ser reescrita como:

$$-\delta\tau_f^Q = t_j = A_j\delta R^i + B_j\delta r^i, \quad (5.64)$$

onde

$$A_{1(2)} = \frac{M}{MV^i - (-)^{1(2)}m_{2(1)}v^i}, \quad (5.65)$$

$$B_{1(2)} = \frac{-(-)^{1(2)}}{\delta r^i} \int_{r_0}^{r_n} \frac{m_{2(1)}dr}{MV - (-)^{1(2)}m_{2(1)}v}. \quad (5.66)$$

sendo que  $\delta r^i = r_0 - r_n$ .

Novamente, através de (5.25), (5.30) e (5.64), podemos construir a matriz monodrômica  $M_2$  que relaciona  $\delta\Gamma_f$  e  $\delta\Gamma_i$  para as colisões da *partícula* com a parede da direita ( $j = 2$ ), em relação a partícula 2. Lembrando que o resultado final será generalizado para ambas as partículas. Deste modo, temos que:

$$F(\Gamma_i) = \begin{pmatrix} v^i \\ V^i \\ Q(r) \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (5.67)$$

e

$$F[C(\Gamma_i)] = \begin{pmatrix} -\kappa v^i + 2V^i \\ \frac{2\mu}{M}v^i + \kappa V^i \\ Q(r) \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (5.68)$$

Reescrevendo à equação,

$$\delta\Gamma_f = \frac{\partial C}{\partial \Gamma} \delta\Gamma_i + \left\{ \frac{\partial C}{\partial \Gamma} F(\Gamma_i) - F[C(\Gamma_i)] \right\} \delta\tau_f, \quad (5.69)$$

em termos das matrizes (5.67) e (5.68), teremos:

$$\delta\Gamma_f = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\kappa & 2 \\ 0 & 0 & \frac{2\mu}{M} & \kappa \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta r^i \\ \delta R^i \\ \delta v^i \\ \delta V^i \end{pmatrix} + \left[ \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\kappa & 2 \\ 0 & 0 & \frac{2\mu}{M} & \kappa \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v^i \\ V^i \\ Q(r) \\ 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} -\kappa v^i + 2V^i \\ \frac{2\mu}{M}v^i + \kappa V^i \\ Q(r) \\ 0 \end{pmatrix} \right] \delta\tau_f, \quad (5.70)$$

que também pode ser expressa na forma de um conjunto de equações, da forma:

$$\delta r^f = \delta r^i + (v^i + \kappa v^i - 2V^i) \delta\tau_f, \quad (5.71)$$

$$\delta R^f = \delta R^i + \left( V^i - \frac{2\mu}{M}v^i + \kappa V^i \right) \delta\tau_f, \quad (5.72)$$

$$\delta v^f = -\kappa\delta v^i + 2\delta V^i + [-\kappa Q(r) - Q(r)]\delta\tau_f, \quad (5.73)$$

$$\delta V^f = \frac{2\mu}{M}\delta v^i + \kappa\delta V^i + \left[\frac{2\mu}{M}Q(r)\right]\delta\tau_f. \quad (5.74)$$

Agora, substituindo o tempo de atraso (5.64) em (5.71), (5.72), (5.73) e (5.74) chegaremos ao seguinte conjunto de equações:

$$\begin{aligned} \delta r^f &= -\kappa\delta r^i + 2\delta R^i, \\ \delta R^f &= \frac{2\mu}{M}\delta r^i + \kappa\delta R^i, \\ \delta v^f &= A_2Q(r)\kappa_2\delta r^i + B_2Q(r)\kappa_2\delta R^i - \kappa v^i + 2\delta V^i, \\ \delta V^f &= \frac{2\mu}{M}B_2Q(r)\delta r^i + \frac{2\mu}{M}A_2Q(r)\delta R^i + \frac{2\mu}{M}\delta v^i + \kappa\delta V^i, \end{aligned} \quad (5.75)$$

pelas quais obtemos a matriz monodrômica para a partícula 2, da forma:

$$M_2 = \begin{pmatrix} -\kappa & 2 & 0 & 0 \\ \frac{2\mu}{M} & \kappa & 0 & 0 \\ \kappa_2Q(r)B_2 & \kappa_2Q(r)A_2 & -\kappa & 2 \\ \frac{2\mu}{M}Q(r)B_2 & \frac{2\mu}{M}Q(r)A_2 & \frac{2\mu}{M} & \kappa \end{pmatrix}. \quad (5.76)$$

Estendendo o resultado (5.76) para as colisões da *partícula* em relação a partícula 1 com a parede da esquerda, para então, escrevermos a matriz monodrômica para ambas as partículas, temos:

$$M_1 = \begin{pmatrix} \kappa & -2 & 0 & 0 \\ -\frac{2\mu}{M} & -\kappa & 0 & 0 \\ -\kappa_1Q(r)B_1 & -\kappa_1Q(r)A_1 & \kappa & -2 \\ -\frac{2\mu}{M}Q(r)B_1 & -\frac{2\mu}{M}Q(r)A_1 & -\frac{2\mu}{M} & -\kappa \end{pmatrix}. \quad (5.77)$$

Portanto, a matriz monodrômica que relaciona os pontos no espaço tangente imediatamente antes e imediatamente depois de cada colisão da *partícula* com as paredes é dada por:

$$M_j = (-1)^j \begin{pmatrix} -\kappa & 2 & 0 & 0 \\ \frac{2\mu}{M} & \kappa & 0 & 0 \\ \kappa_jQ(r)B_j & \kappa_jQ(r)A_j & -\kappa & 2 \\ \frac{2\mu}{M}Q(r)B_j & \frac{2\mu}{M}Q(r)A_j & \frac{2\mu}{M} & \kappa \end{pmatrix}, \quad (5.78)$$

onde  $\kappa_j = -[\kappa + (-1)^j]$  e lembrando que  $j = 1(2)$  refere-se a partícula 1(2). O determinante de  $M_j$  é igual a 1 e seus autovalores também serão iguais a  $|1|$ . Entretanto, se construirmos uma trajetória da *partícula* no espaço tangente através do produto de matrizes, perceberemos que os termos  $\kappa_j$ ,  $Q(r)$ ,  $A_j$  e  $B_j$ , são os responsáveis por obtermos autovalores da matriz (5.27) que não sejam iguais a  $|1|$ . Por este motivo, os expoentes de Lyapunov calculados terão valores positivos.

É também interessante observar que no limite de um grande alcance de interação entre as

partículas ( $\alpha = 0$ ) em cada colisão da *partícula* com a parede, a força de interação  $Q(r)$  é finita e os expoentes de Lyapunov podem ser positivos. Se a interação entre partículas estiver no limite de curto alcance de interação ( $\alpha \gg 1$ ), em geral, o potencial de interação  $Q(r) \rightarrow 0$  se as partículas estão suficientemente afastadas e os expoentes de Lyapunov são nulos. Por este motivo concluímos que a dinâmica torna-se caótica, devido ao processo de *dupla colisão*. Este tipo de colisão ocorre com uma das paredes e entre as partículas quase que simultaneamente. Por exemplo, se as partículas 1 e 2 estão movendo-se juntas em direção a parede direita, e que devido ao pequeno alcance da interação, a repulsão entre elas é nulo. Quando a partícula 2 colide com a parede da direita, muda de direção e move-se em direção a partícula 1, colidindo com ela. Como estas duplas colisões ocorrem muito próximas de uma das paredes, os termos  $QA_j$  e  $QB_j$  não serão necessariamente iguais a zero, resultando numa possível dinâmica caótica. O importante papel destas duplas colisões também foi observado em outro modelo físico de duas partículas interagentes aprisionadas num bilhar unidimensional [74].

## 5.2 Resultados Numéricos

### 5.2.1 Distribuição dos Expoentes de Lyapunov Máximos a Tempo-Finito $P(\Lambda_t, \gamma)$

Na descrição da dinâmica através das matrizes monodrômicas construídas na seção 5.1, ficou claro que o movimento caótico é gerado pela presença do potencial que representa as interações suaves entre partículas. Nesta seção, estamos interessados em detectar sinais de movimento não-ergódico, no sistema de duas partículas interagentes aprisionadas num bilhar unidimensional em função da razão de massas das partículas. Com este objetivo, vamos investigar a distribuição  $P(\Lambda_t, \gamma)$ , do expoente de Lyapunov máximo a tempo-finito  $\Lambda_t$ , como função da razão de massas  $\gamma$ . Em geral, a tempo infinito, os expoentes de Lyapunov  $\Lambda_\infty$  são bem definidos e não dependem das condições iniciais. Isto também é válido para intervalos de tempo razoavelmente longos, se o sistema é ergódico e o espectro dos expoentes de Lyapunov apresentarem boas propriedades de convergência. Em sistemas quase-integráveis, as trajetórias caóticas podem aproximar-se de ilhas de regularidade, e assim serem aprisionadas por algum tipo de armadilha dinâmica, fazendo com que o valor do expoente de Lyapunov local decresça. Este fenômeno afeta a convergência do expoente de Lyapunov a tempo-finito  $\Lambda_t$ , que agora pode depender das condições iniciais. Em contrapartida, isso implica que a distribuição  $P(\Lambda_t, \gamma)$  calculada sobre muitas condições iniciais, contenha informações sobre o movimento regular e sobre as trajetórias aprisionadas no espaço de fases.



### 5.2.1.1 Procedimento Numérico

A construção do código numérico utilizado no cálculo dos expoentes de Lyapunov a tempo-finito ( $\Lambda_t$ ), para várias condições iniciais, foi baseado no algoritmo desenvolvido por Wolf *et al.* [39]. Os  $\Lambda_t$  serão calculados com auxílio da seguinte equação:

$$\lambda_{max} = \lim_{n \rightarrow +\infty} \frac{1}{n\tau} \sum \ln \left( \left| \frac{\delta \vec{\gamma}(\tau)}{\delta \vec{\gamma}(0)} \right| \right), \quad (5.79)$$

conforme exposto no Capítulo 2. Para cada trajetória o expoente de Lyapunov local é calculado  $10^5$  vezes, ou seja, a trajetória satélite é reinicializada  $10^5$  vezes, de acordo com o esquema apresentado na figura 10. Fixamos as paredes do bilhar na posição  $q = \pm 1$ . As condições iniciais utilizadas no cálculo da distribuição dos expoentes de Lyapunov máximos a tempo-finito  $P(\Lambda_t, \gamma)$ , são determinadas ou escolhidas randomicamente pelo código numérico.

O tempo de integração das equações de movimento para cada trajetória foi de  $t = 10^4$ , com energia  $E = 10$ , constante. Fixamos a intensidade do potencial de Yukawa  $V_0 = 1$ , e estudamos dois casos específicos em que variamos o alcance de interação entre as partículas:  $\alpha = 0$  e  $\alpha = 10$ . Integramos as equações de movimento através do método de Runge-Kutta de ordem 4. Evoluímos 400 trajetórias para cada razão de massas, variando  $\gamma$  num passo de  $\Delta\gamma = 0,01$ , no intervalo de  $\gamma = 1,0$  até  $\gamma = 4,0$ . Após obtermos  $\Lambda_t$ , calculamos a distribuição destes expoentes  $P(\Lambda_t, \gamma)$ , e a distribuição do expoente de Lyapunov de maior probabilidade de ocorrência  $P_\Lambda(\gamma)$  como função da razão de massas das partículas.

Conforme exposto no parágrafo anterior, para calcularmos numericamente os expoentes de Lyapunov máximos a tempo-finito foi *necessário* fixarmos algumas grandezas físicas, como por exemplo: a energia, a intensidade e o alcance de interação entre as partículas. Evidentemente, que se escolhermos outros valores para estas grandezas os resultados quantitativos e qualitativos mudarão. Também aumentamos a quantidade de condições iniciais de 400 para 600 na obtenção de nossos resultados. Com isso, tentamos detectar informações diferentes das que já havíamos obtido (com 400 condições iniciais). Entretanto, não detectamos nenhuma mudança qualitativa em tais resultados. A vantagem então de utilizarmos 400 condições iniciais em vez de 600, esta no menor período de tempo utilizado no cálculo dos expoentes de Lyapunov máximos a tempo-finito.

Através de seções de Poincaré provamos a existência de trajetórias aprisionadas em torno de ilhas de regularidade (armadilhas dinâmicas). Estas seções foram construídas da seguinte forma: no instante em que uma das partículas colide com a respectiva parede, registramos posição e momento da outra partícula para construir a sua seção de Poincaré. Por exemplo: quando a partícula 1 colide com a parede da esquerda, registramos posição e momento da partícula 2 neste instante, e assim, construiremos a seção de Poincaré referente à partícula 2.

A seguir, apresentaremos dois casos com dinâmicas diferentes. Para ambas as situações man-

tivemos o tempo de integração das equações de movimento, e energia constantes. As paredes do bilhar também permaneceram fixas na posição  $q = \pm 1$ , e condições iniciais foram escolhidas randomicamente. O primeiro caso, refere-se ao limite de grande alcance de interação  $\alpha = 0$ . Já no segundo caso estudamos, o comportamento dinâmico do sistema quando  $\alpha = 10$ . Tanto no primeiro como no segundo caso, a dinâmica do sistema é caótica, entretanto detectamos algumas diferenças que serão discutidas de forma detalhada ao longo desta seção. Em ambos os casos, no limite de  $\gamma \rightarrow \infty$ , a dinâmica do sistema torná-se integrável, ou seja, quando uma das partículas apresentar massa muito maior do que a outra.

### 5.2.1.2 Caso 1: $\alpha = 0$ (Limite de Longo Alcance)

Começamos a discussão deste caso apresentando as séries temporais das partículas 1 e 2 para quatro razões de massas específicas. Estas séries temporais apresentam a dinâmica de apenas uma trajetória, gerada com a mesma condição inicial, conforme figura 24. A velocidade da partícula 2 é determinada via conservação da energia do sistema, enquanto a velocidade da partícula 1 é escolhida aleatoriamente. As séries temporais são apresentadas de forma sistemática: iniciando com  $\gamma = 1,0$ , e em intervalos discretos de  $\Delta\gamma = 1,0$  terminamos com  $\gamma = 4,0$ . Como  $\alpha = 0$ , a interação entre as partículas é dada pelo potencial de Coulomb. Através desta sequência é possível visualizar a mudança na dinâmica do sistema quando variamos o parâmetro  $\gamma$ , ou seja, a dependência da razão de massas no movimento das partículas. Se escolhermos outra condição inicial a dinâmica do sistema apresentada pelas mesmas séries temporais muda, entretanto a explícita dependência à razão das massas das partículas continua clara e evidente.

Para calcularmos os expoentes de Lyapunov máximos a tempo-finito, através da equação (5.79), devemos escolher adequadamente o valor de  $\tau$ . Com este objetivo, testamos três possíveis valores de  $\tau$ : 0,1; 0,2; 0,3. Selecionamos randomicamente cinco condições iniciais que foram utilizadas no cálculo de cinco expoentes de Lyapunov, para cada valor de  $\tau$ , conforme a figura 25. Nas figuras 25-(a) e (b) percebemos que existe uma certa semelhança na configuração dos cinco expoentes de Lyapunov calculados. Em contrapartida, na figura 25-(c) o comportamento é totalmente diferente dos dois primeiros casos. Então, escolhemos aleatoriamente mais dez condições iniciais, separadas em dois grupos de cinco. Feito isso, novamente calculamos os expoentes de Lyapunov máximos a tempo-finito, e constatamos que as semelhanças entre os dois primeiros casos da figura 25 continuaram aparecendo. Por este motivo, optamos em fixar o valor de  $\tau$  em 0,2.

Escolhido o valor adequado de  $\tau$ , calculamos a distribuição dos expoentes de Lyapunov a tempo-finito, e desta distribuição extraímos o valor médio dos expoentes de Lyapunov máximos  $\Lambda_t$ . No cálculo valor médio dos expoentes de Lyapunov máximos a tempo-finito  $\langle \Lambda_t(\gamma) \rangle$  desprezamos valores de  $\Lambda_t$  menores que 0,1 pois com o incremento da razão das massas das partículas

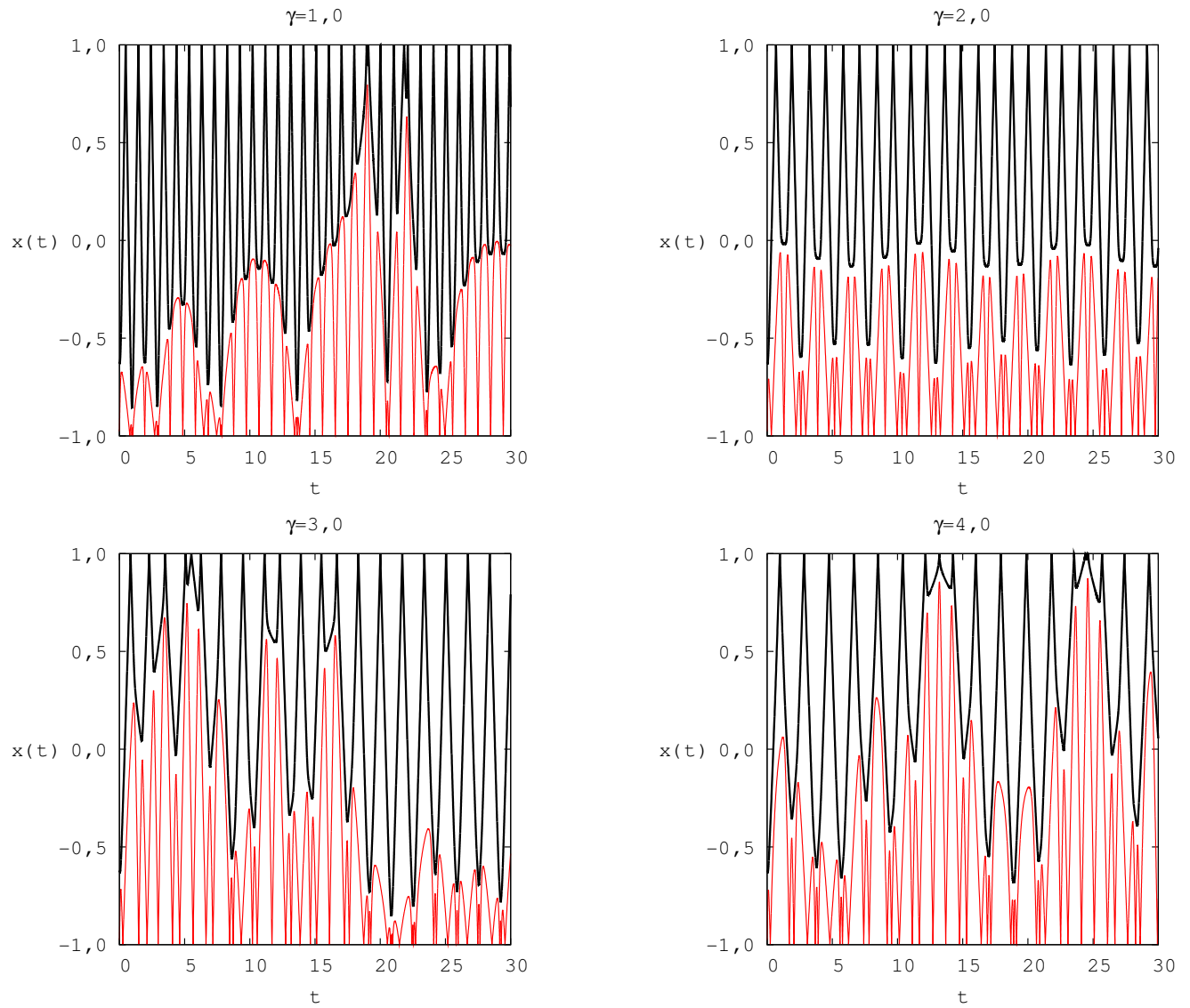


Figura 24: Movimento das partículas 1 em cinza e 2 em preto descrito durante um intervalo de tempo  $t = 30$ , para  $\gamma = 1,0$ ;  $2,0$ ;  $3,0$ ;  $4,0$ , respectivamente.

aparecem muitos expoentes de Lyapunov que apresentaram valores bem próximos a zero. Através do  $\langle \Lambda_t(\gamma) \rangle$ , provamos numericamente o que já havíamos mostrado analiticamente na seção 5.1, que este sistema é caótico e com o aumento no valor de  $\gamma$  ele torna-se mais regular, conforme ilustrado na figura 26. Podemos verificar nesta figura, que os valores de  $\langle \Lambda_t(\gamma) \rangle$  decrescem monotonicamente de aproximadamente 0,90 para 0,54 com  $\gamma$  variando de 1,0 até 4,0. Lembrando que no limite de  $\gamma \rightarrow \infty$ , o sistema será totalmente integrável.

Na figura 27 apresentamos a distribuição dos expoentes de Lyapunov máximos a tempo-finito como função da razão das massas das partículas  $P(\Lambda_t, \gamma)$ . Analisando esta figura percebemos, como já havíamos constatado na figura 26, que a dinâmica deste sistema torna-se mais regular com o incremento da razão das massas das partículas. Podemos ainda extrair duas informações importantes da distribuição  $P(\Lambda_t, \gamma)$ :

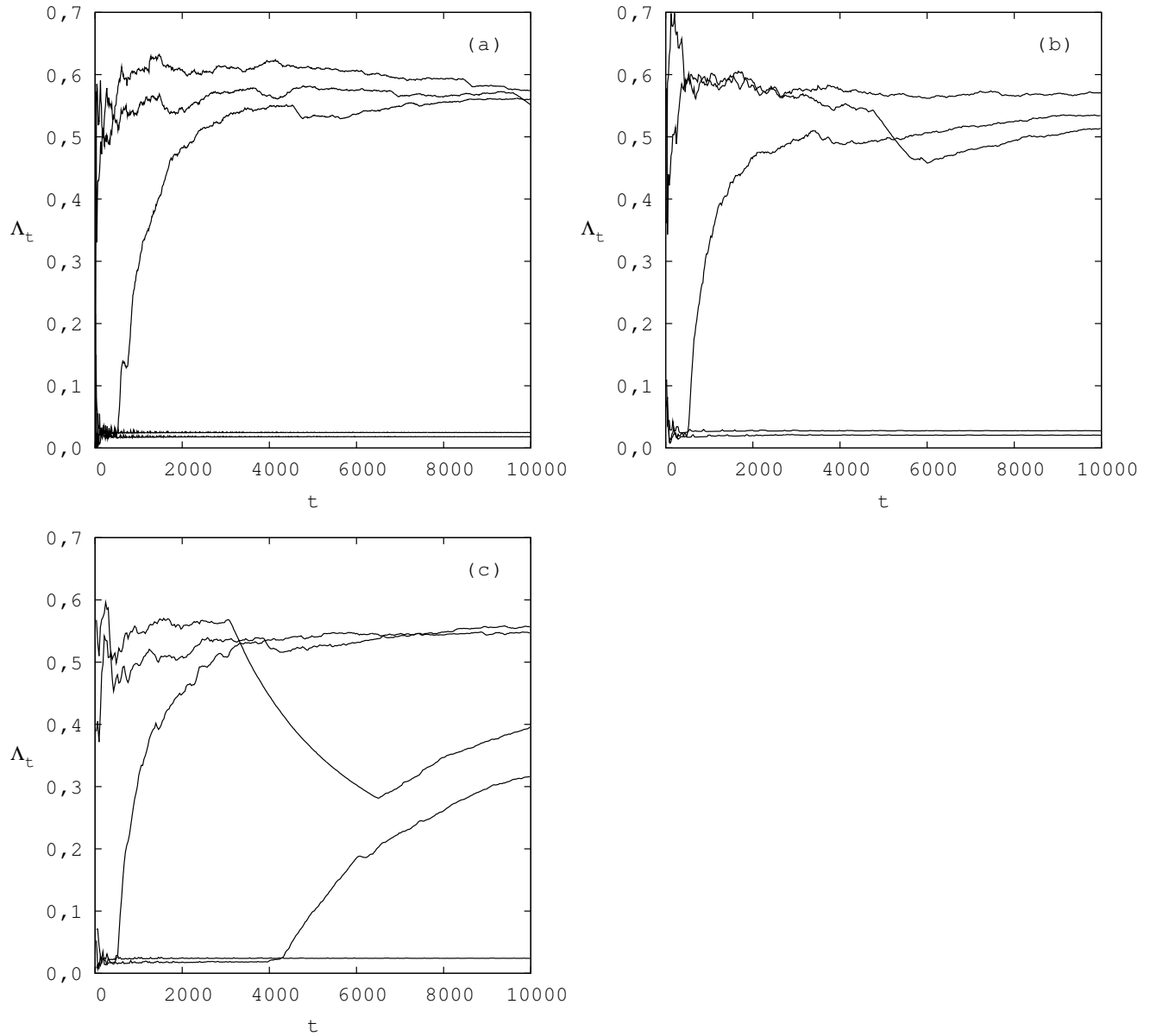


Figura 25: Cinco expoentes de Lyapunov máximos a tempo-finito, para razão de massas entre as partículas  $\gamma = 4,0$ . (a)  $\tau = 0,1$ ; (b)  $\tau = 0,2$ ; (c)  $\tau = 0,3$ .

- o valor de  $\langle \Lambda_t(\gamma) \rangle$ , decresce;
- um grande número de condições iniciais afetam  $\Lambda_t(\gamma)$ , de tal forma que  $\langle \Lambda_t(\gamma) \rangle$  diminui, devido à presença de armadilhas dinâmicas que aprisionam as trajetórias caóticas por um certo intervalo de tempo, influenciando a convergência do expoente de Lyapunov máximo a tempo-finito. Há também uma parcela de condições iniciais que fazem com que o  $\Lambda_t(\gamma)$  convirja exatamente para zero, consequência da presença de ilhas de movimento regular e do incremento de  $\gamma$ .

Em  $\gamma = 4,0$ , por exemplo, mais de 15% das condições iniciais levam a  $\Lambda_t = 0,0$ . Os pontos cinzas abaixo da curva representam expoentes de Lyapunov máximos cujo valor diminui em relação ao  $\langle \Lambda_t(\gamma) \rangle$  devido a influência das armadilhas dinâmicas. Ou seja, os pontos cinzas abaixo da curva

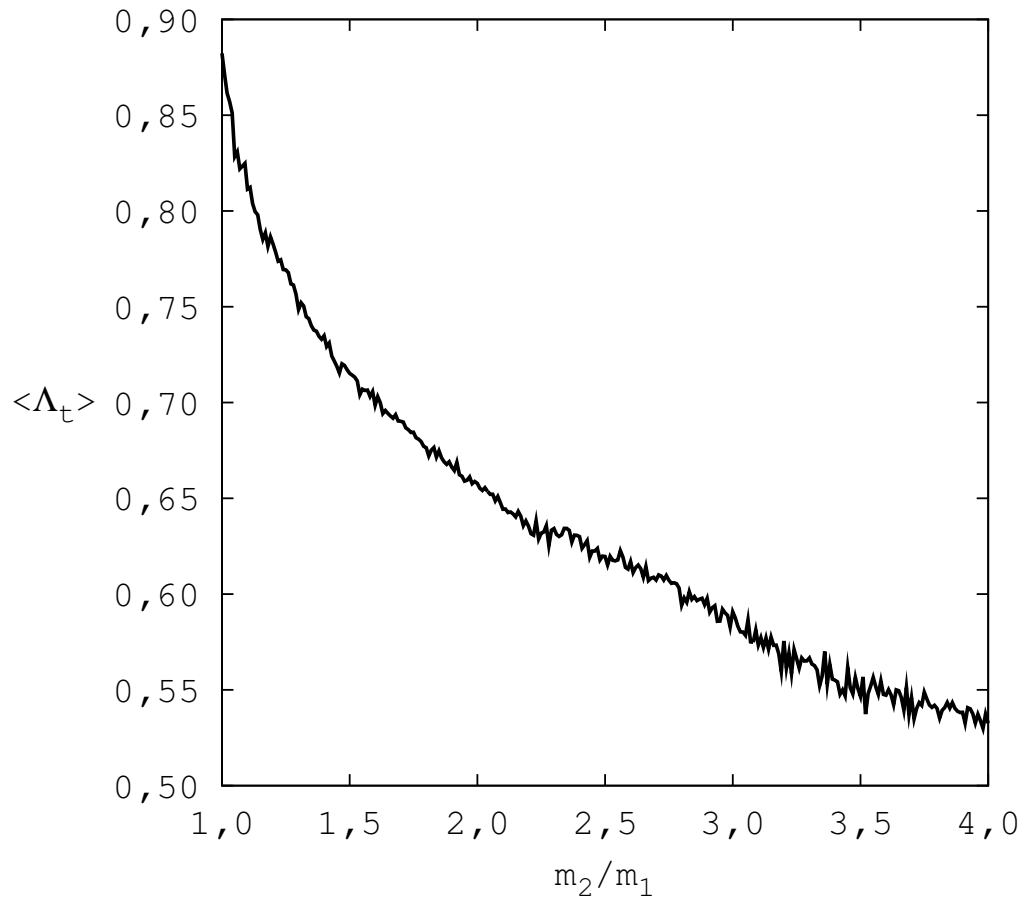


Figura 26: Valor médio do expoente de Lyapunov máximo a tempo-finito calculado sobre 400 trajetórias.

principal estão relacionados com as trajetórias caóticas que estão aprisionadas em armadilhas dinâmicas, por um certo tempo, nos contornos de ilhas de regularidade.

Uma característica interessante da figura 27 é a mudança na região, ou no ponto de máximo de  $P(\Lambda_t, \gamma)$ , em torno do expoente de Lyapunov máximo de maior probabilidade de ocorrência  $\Lambda_t^p(\gamma)$ , definido por:

$$\left. \frac{\partial P(\Lambda_t, \gamma)}{\partial \Lambda_t} \right|_{\Lambda_t = \Lambda_t^p} = 0. \quad (5.80)$$

Na figura 27, percebemos ainda que para razões de massas entre  $\Lambda \sim 1,5$  e  $\Lambda \sim 2,2$ , muitas condições iniciais levam ao mesmo valor de  $\Lambda_t$ . Isso significa que, nesta região,  $\Lambda_t^p(\gamma)$  tem um máximo como função de  $\gamma$ . Em outras palavras, quase todas as condições iniciais convergem para o mesmo valor de  $\Lambda_t$ . É importante e necessário chamar atenção para a menor densidade de pontos cinzas abaixo da curva principal que estão relacionados às trajetórias aprisionadas nos contornos de armadilhas dinâmicas.

Uma forma sistemática de descrever a dispersão na  $P(\Lambda_t, \gamma)$  pode ser feita através da distribuição dos expoentes de Lyapunov de maior probabilidade de ocorrência  $P_\Lambda(\gamma)$ . Para determi-

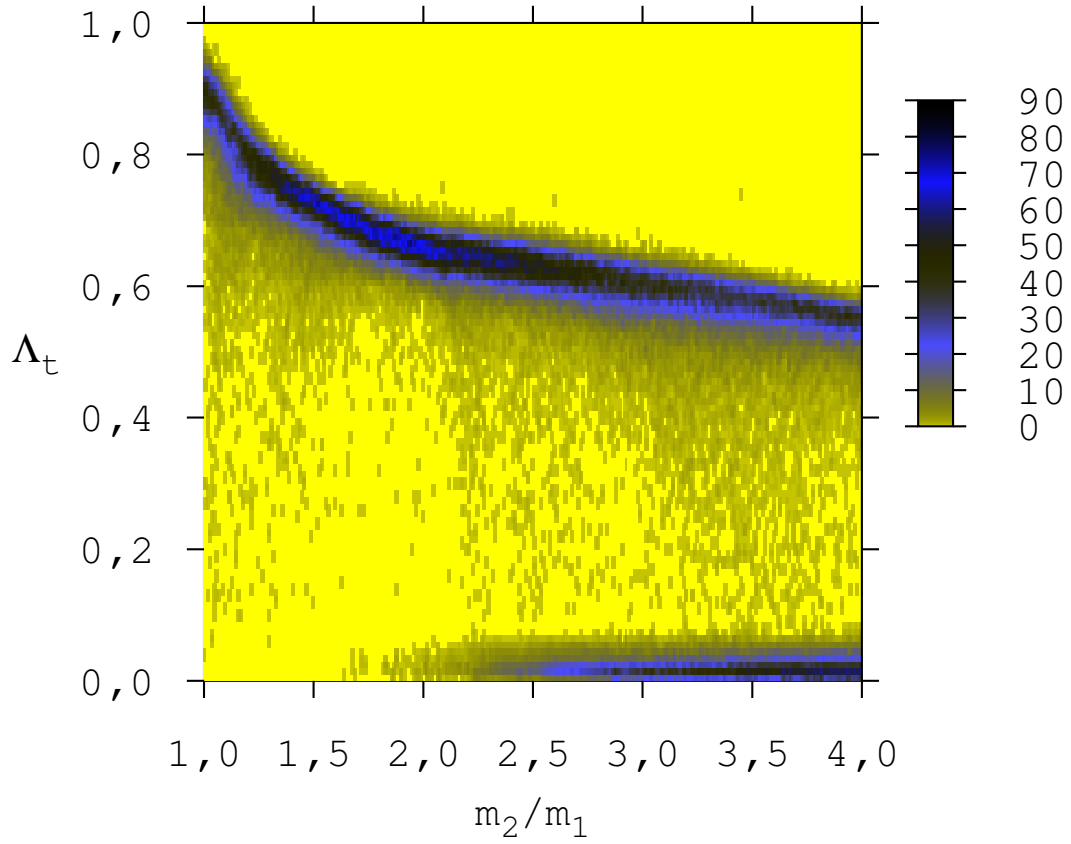


Figura 27: Distribuição dos expoentes de Lyapunov máximos a tempo-finito  $P(\Lambda, \gamma)$ , calculados sobre 400 trajetórias. Com o incremento de  $P(\Lambda_t, \gamma)$  as cores mudam: cinza sobre o amarelo e azul sobre o preto.

na função  $P_\Lambda(\gamma)$  fizemos um “corte” na  $P(\Lambda_t, \gamma)$ , de tal forma que teremos  $P(\Lambda_t^p, \gamma) \equiv P_\Lambda(\gamma)$ , como uma função da razão de massas das partículas  $\gamma$ , conforme a figura 28.

Comparando as figuras 27 e 28, constatamos que na região onde  $P_\Lambda(\gamma)$  tem um máximo, uma grande fração de condições iniciais levam ao mesmo valor de  $\Lambda_t$  diminuindo a dispersão em torno de  $\Lambda_t^p(\gamma)$ , e conseqüentemente as trajetórias aprisionadas são raras. Por exemplo, o máximo de  $P_\Lambda(\gamma)$  ocorre aproximadamente em  $\gamma \sim 1,9$  e está na região da figura 27 onde os pontos cinzas abaixo da curva quase desaparecem. A rápida variação de  $P_\Lambda(\gamma)$  ocorre devido a flutuações estatísticas na determinação de  $\Lambda_t$  sobre as 400 condições iniciais. Aparecem duas regiões de mínimo principais na figura 28, localizados em  $\gamma \sim 1,0$  e  $\gamma \sim 3,0$ . Neste caso, é importante chamar a atenção para estes valores que são exatamente as razões de massas em que a dinâmica das colisões entre partículas rígidas o número genus é igual a um ( $g = 1$ ) [19] e a dinâmica não é ergódica. Em outras palavras, se  $\gamma$  estiver num limite integrável para o caso de partículas rígidas colidindo frontalmente, a dispersão em torno de  $\Lambda_t^p$  aumenta enquanto que  $P_\Lambda$  diminui. Deste modo, esperamos que a dinâmica seja não-ergódica, mesmo havendo uma interação entre as partículas dada pelo potencial de Yukawa.

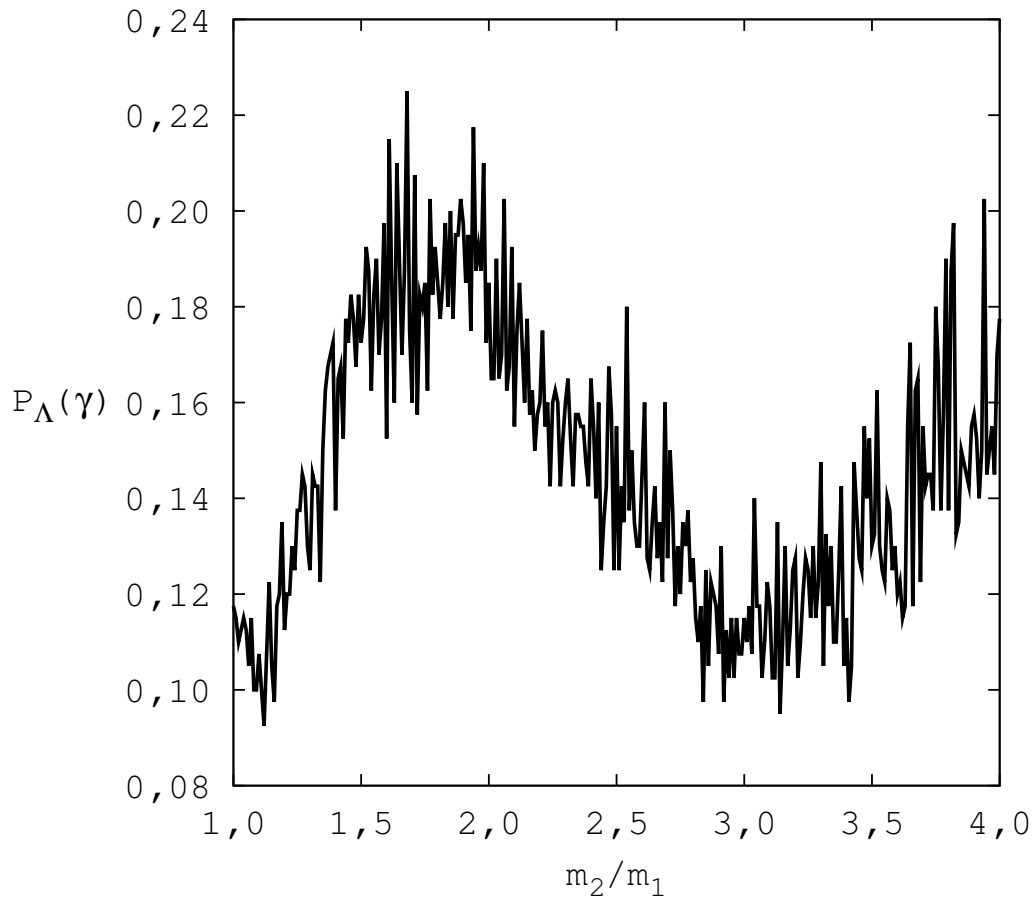


Figura 28: Distribuição normalizada  $P_{\Lambda}(\gamma)$  do expoente de Lyapunov de maior probabilidade de ocorrência  $\Lambda_t^p$ , extraído da figura 27.

Com isso, concluímos que sinais dos casos integráveis remanescentes do problema de duas partículas rígidas colidindo frontalmente existem e são descobertos pela dispersão do expoentes de Lyapunov máximos a tempo-finito  $\Lambda_t(\gamma)$ . E isso é claramente visível no “corte”  $P_{\Lambda}(\gamma)$ , que determina a distribuição dos expoentes de Lyapunov de maior probabilidade de ocorrência  $\Lambda_t^p(\gamma)$ , definido pela Eq. (5.80).

Através das seções de Poincaré, fundamentamos ainda mais nossas interpretações físicas, como por exemplo: a presença de armadilhas dinâmicas no espaço de fases. A figura 29, consiste em duas seções de Poincaré, e suas respectivas ampliações. São apresentados os casos de  $\gamma = 3,0$  e  $\gamma = 4,0$ , onde  $P_{\Lambda}(\gamma)$  tem um mínimo e um máximo (ver figura 28), respectivamente. Embora o sistema seja “mais caótico” em  $\gamma = 3,0$  do que  $\gamma = 4,0$ , trajetórias aprisionadas aparecem próximas de ilhas para  $\gamma = 3,0$ , conforme podemos observar na correspondente ampliação, na figura 29 (superior, direita). As trajetórias aprisionadas em torno das ilhas de regularidade, que não aparecem em  $\gamma = 4,0$  (ver figura 29 (embaixo, esquerda)), afetam  $P(\Lambda_t^p, \gamma)$  e conseqüentemente,  $P_{\Lambda}(\gamma)$  tem um mínimo próximo a  $\gamma = 3,0$ . Lembrando que,  $P_{\Lambda}(\gamma)$  é determinado somente para trajetórias com  $\Lambda_t(\gamma)$  positivo. Com isso, podemos obter informações sobre estruturas regulares no espaço de fases através das trajetórias caóticas que são aprisionadas nos contornos de ilhas de regularidade.



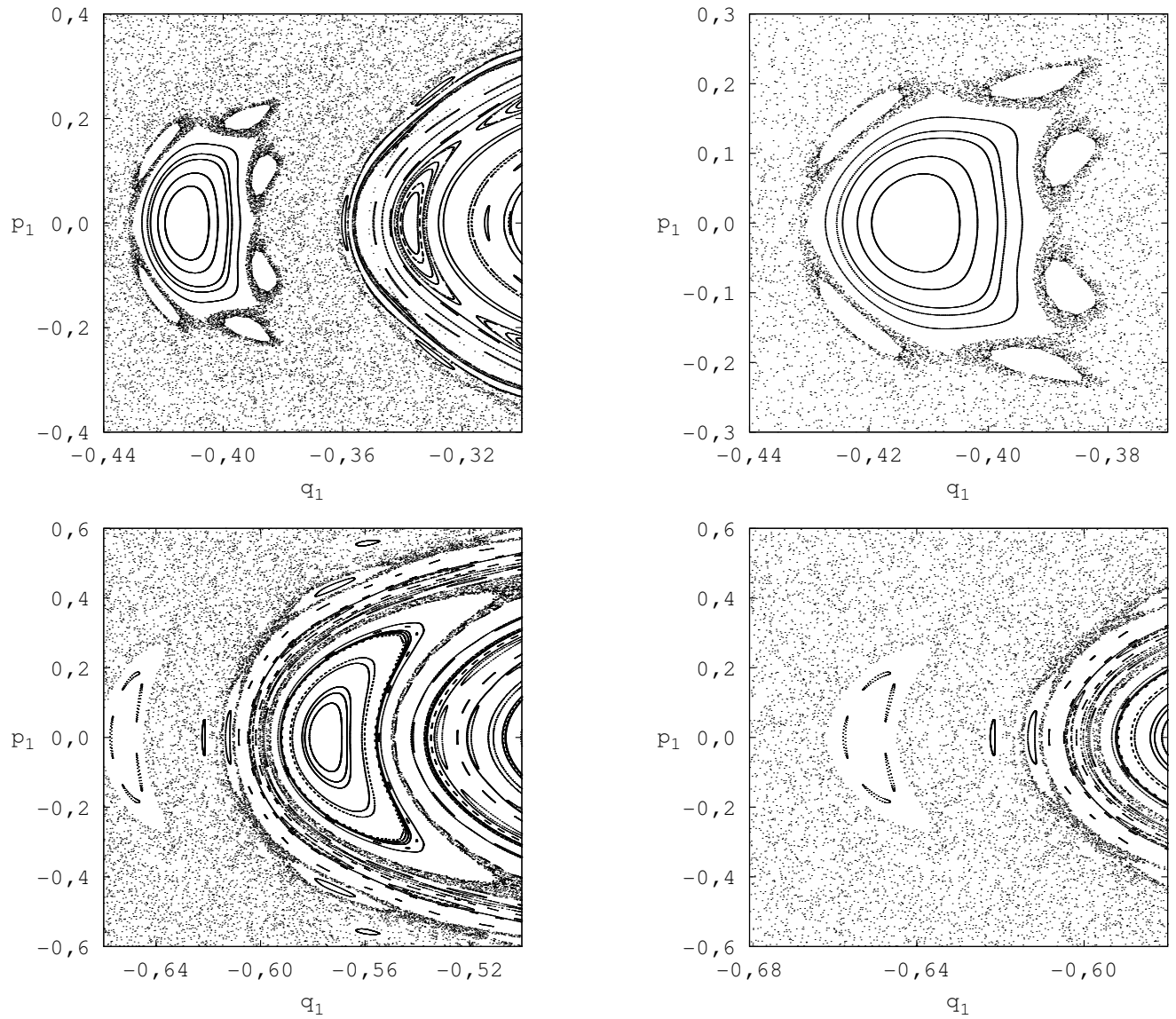


Figura 29: Seções de Poincaré para  $\gamma = 3,0$  (superior) e  $\gamma = 4,0$  (abaixo). As figuras da direita são ampliações que mostram as regiões quase-regulares da respectiva figura da esquerda.

Estas trajetórias aprisionadas são características de espaços de fases mesclados (“*mixing*”). Deste modo, constatamos que  $P_\Lambda(\gamma)$  fornece uma ferramenta para analisar espaços de fases mesclados.

### 5.2.1.3 Caso 2: $\alpha = 10$ (Limite de Curto Alcance de Interação)

O estudo e descrição deste caso baseia-se no mesmo procedimento de análise do caso de  $\alpha = 0$ , embora aqui haja uma diferença crucial: o valor de  $\alpha$ . Do mesmo modo que no caso 1, iniciamos discutindo as séries temporais construídas com o mesmo conjunto de parâmetros e mesma condição inicial, exceto o valor de  $\alpha$  que agora é igual a 10. Novamente constatamos a influência da razão de massas das partículas na dinâmica do sistema. Além dos valores plotados no caso 1, plotamos ainda as séries temporais de dois valores especiais de razões de massas para  $\gamma = 2,6$  e  $2,8$ , conforme a figura 30. Em torno destes valores de  $\gamma$ , ocorre o nascimento de ilhas de regularidade que são



descobertas pela distribuição dos expoentes de Lyapunov máximos a tempo-finito  $P(\Lambda_t, \gamma)$ . O nascimento destas ilhas será comprovado a seguir através de seções de Poincaré. Certamente, a principal informação extraída das séries temporais refere-se a mudança na dinâmica do sistema com a variação do parâmetro  $\gamma$ .

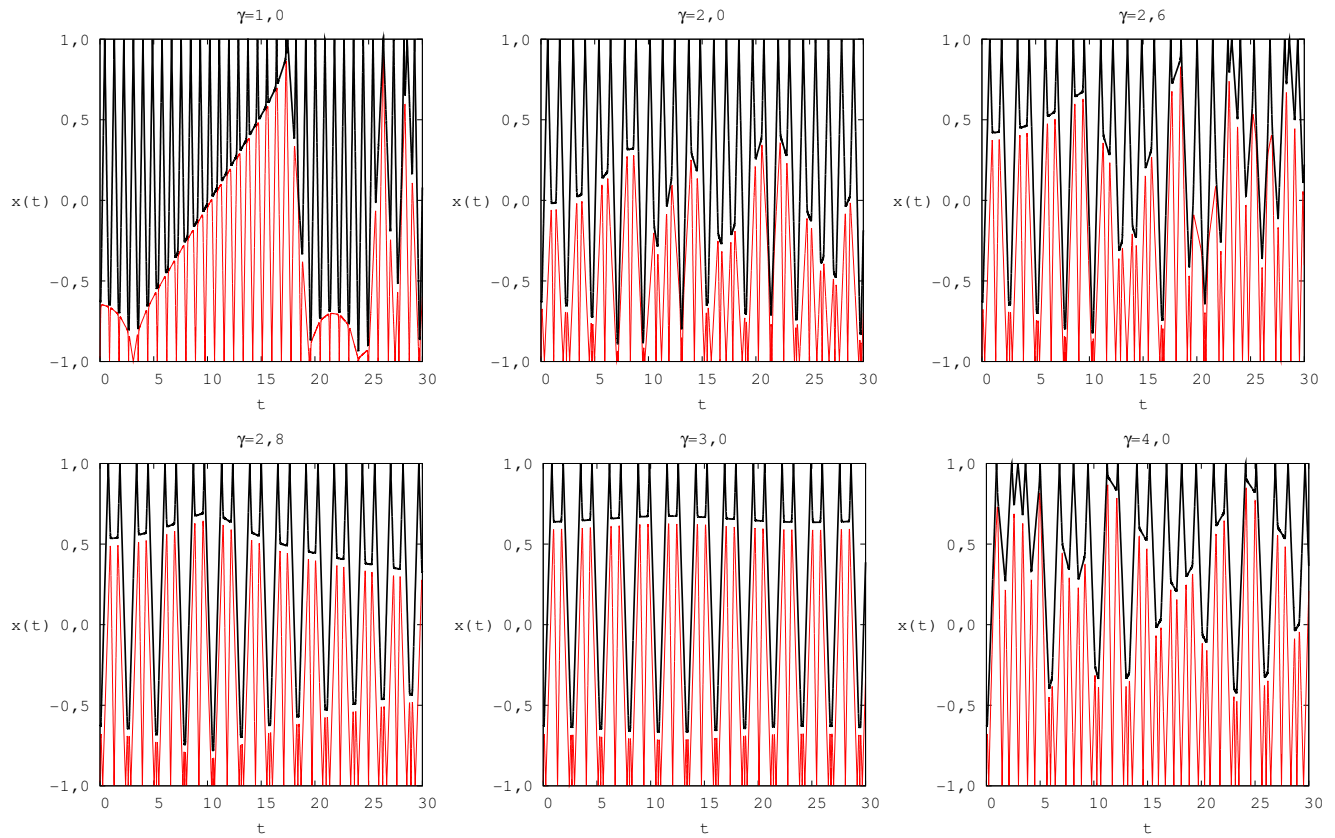


Figura 30: Séries temporais das partículas 1 em cinza e 2 em preto descritas durante um intervalo de tempo  $t = 30$ , para  $\gamma = 1,0; 2,0; 3,0; 4,0$ , respectivamente.

Neste caso, também testamos três possíveis valores de  $\tau$ , conforme feito no caso de  $\alpha = 0$ . Escolhemos randomicamente cinco condições iniciais que geraram cinco expoentes de Lyapunov, para cada valor de  $\tau$ :  $0,1; 0,2; 0,3$ . Nas figuras 31-(a) e (b) constatamos que existe uma certa semelhança entre os expoentes de Lyapunov calculados. Mais dez expoentes de Lyapunov foram calculados, referentes a outras dez condições iniciais e similarmente ao que observamos anteriormente, existe uma grande semelhança entre os casos de  $\tau = 0,1$  e  $\tau = 0,2$ . Portanto, novamente escolhemos o valor de  $\tau = 0,2$ , para calcularmos a distribuição dos expoentes de Lyapunov máximos a tempo-finito como função da razão de massas  $P(\Lambda_t, \gamma)$ .

A partir da distribuição dos expoentes de Lyapunov máximos a tempo-finito  $P(\Lambda_t, \gamma)$ , calculamos o valor médio de  $\Lambda_t$ , apresentado na figura 32. Por existir uma quantidade considerável de expoentes de Lyapunov com valores próximos a zero, descartamos os expoentes menores a  $0,1$  conforme fizemos no caso de  $\alpha = 0$ . Da mesma forma que no primeiro caso,  $\Lambda_t$  decresce monotonicamente aproximadamente de  $0,80$  para  $0,53$  com  $\gamma$  variando de  $1,0$  até  $4,0$ . Podemos observar também que a dinâmica torná-se mais regular com o incremento de  $\gamma$ , entretanto, ainda é caótica

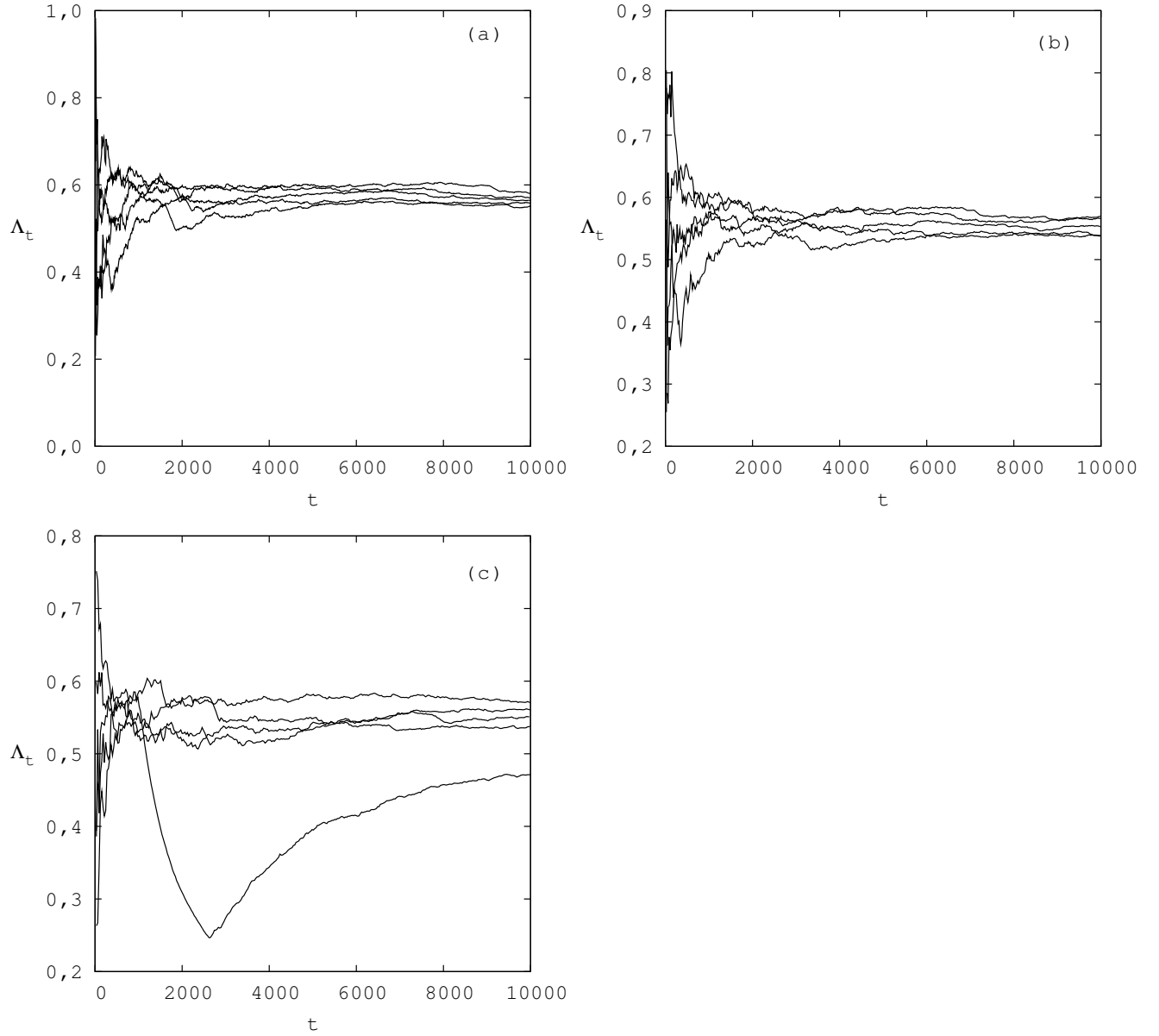


Figura 31: Cinco expoentes de Lyapunov máximos a tempo-finito, para razão de massas entre as partículas  $\gamma = 4,0$ . (a)  $\tau = 0,1$ ; (b)  $\tau = 0,2$ ; (c)  $\tau = 0,3$ .

mesmo com a interação entre partículas estar no limite de curto alcance de interação.

Na figura 33, apresentamos a distribuição dos expoentes de Lyapunov máximos a tempo-finito  $P(\Lambda_t, \gamma)$ . Analisando esta figura percebemos que existem duas diferenças interessantes entre as figuras 27 e 33. A primeira delas refere-se ao aparecimento abrupto de pontos escuros abaixo da curva principal a partir de  $\gamma \sim 2,7$ , que indica o nascimento de ilhas de regularidade. Por este motivo, no final desta seção apresentaremos uma seqüência de seções de Poincaré comprovando aparecimento de tais ilhas. A segunda diferença pode ser enunciada como: enquanto que no caso de  $\alpha = 0$ , surgiu uma região de máximo entre  $\gamma \sim 1,5$  e  $\gamma \sim 2,4$ , neste caso ( $\alpha = 10$ ), aparecem duas regiões de máximo, uma em  $\gamma \sim 1,5$ , e outra em  $\gamma \sim 2,4$  separadas por uma região de mínimo em  $\gamma \sim 1,9$ . No vale que aparece  $\gamma \sim 1,9$ , a dispersão em torno de  $\Lambda_t(\gamma)$  é maior que

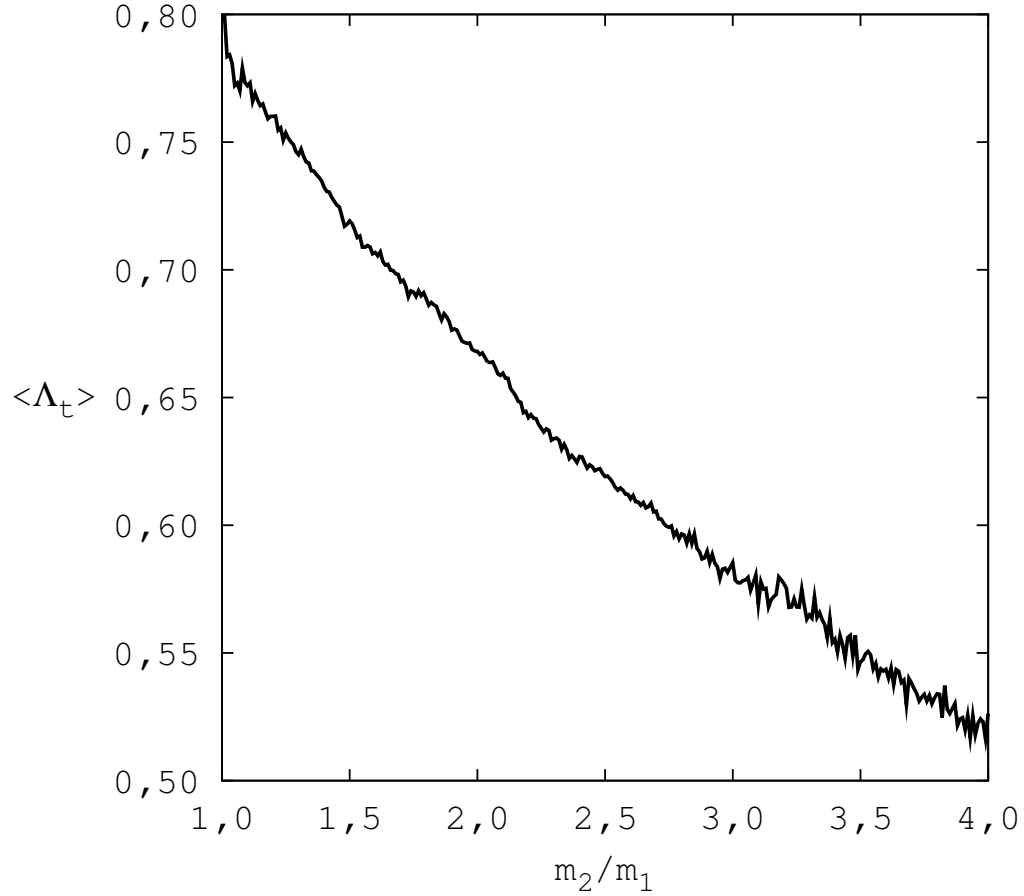


Figura 32: Valor médio do expoente de Lyapunov máximo a tempo-finito.

nas regiões de máximo ( $\gamma \sim 1,5$  e  $\gamma \sim 2,4$ ). Em outras palavras, existe uma quantidade maior de trajetórias aprisionadas.

A segunda diferença pode ser melhor visualizada e entendida através da distribuição dos expoentes de Lyapunov máximos de maior probabilidade de ocorrência obtida a partir de  $P(\Lambda_t, \gamma)$ , fazendo  $P(\Lambda_t, \gamma) \equiv P_\Lambda(\gamma)$ , conforme figura 34. Quando  $P_\Lambda(\gamma)$  tem um máximo, uma grande fração de condições iniciais levam ao mesmo valor de  $\Lambda_t(\gamma)$  e existem poucas trajetórias aprisionadas. O sistema pode então, apresentar uma dinâmica que não seja ergódica, mesmo havendo a interação via potencial de Yukawa entre as partículas. É possível constatar que a figura 34 apresenta um vale adicional em  $\gamma \sim 1,9$ , como acabamos de mencionar. Este corresponde exatamente a um caso de pseudo-integrabilidade com número genus  $g = 2$  no problema de colisões de partículas rígidas, conforme mostramos no Capítulo 4. Neste caso, se  $\gamma$  aproximar-se de valores para os quais a dinâmica das colisões de partículas rígidas apresenta genus  $g = 2$ , a dispersão em torno de  $\Lambda_t^p$  aumenta, enquanto que a  $P_\Lambda(\gamma)$  diminui. Devemos ressaltar ainda que, o vale em  $\gamma \sim 1,9$  na figura 34 não aparece no primeiro caso ( $\alpha = 0$ ). Isso significa que os casos em que a dinâmica é pseudo-integrável sobrevivem por mais tempo a interações suaves de curto alcance ( $\alpha = 10$ ) do que as interações suaves de longo alcance ( $\alpha = 0$ ).

Na figura 35 apresentamos duas seções de Poincaré: uma para  $\gamma = 1,5$  (esquerda) onde

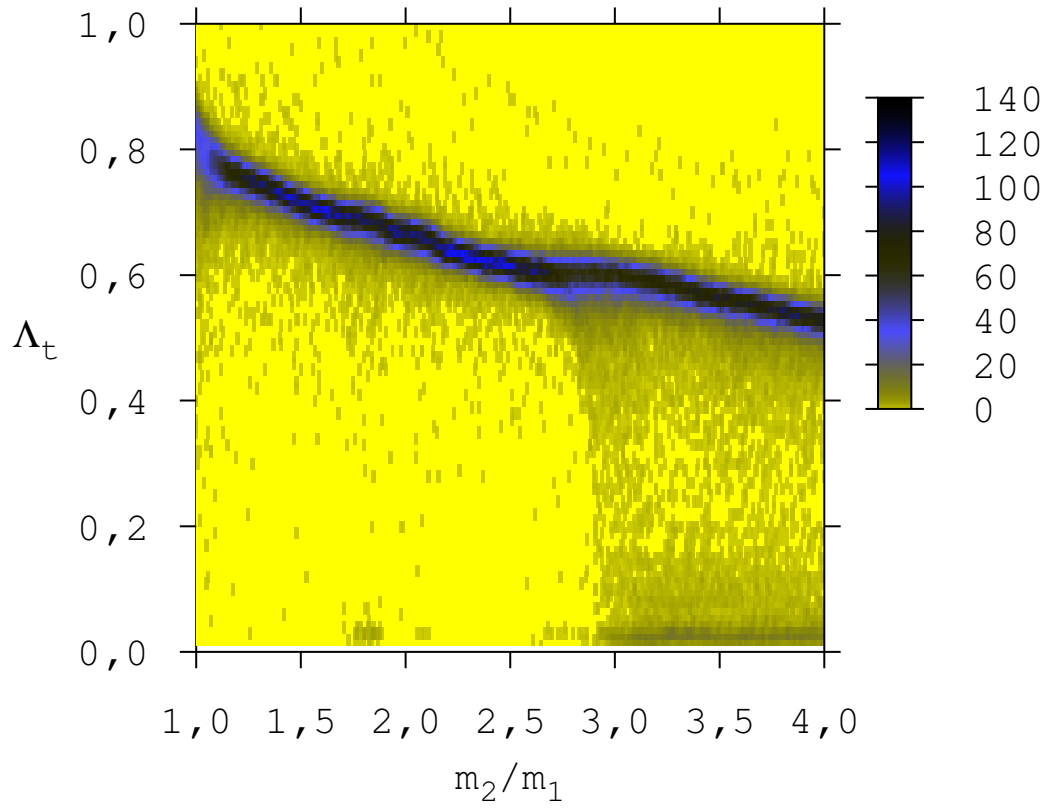


Figura 33: *Distribuição dos expoentes de Lyapunov máximos a tempo-finito,  $P(\Lambda_t, \gamma)$ . Com o incremento de  $P(\Lambda_t, \gamma)$  as cores mudam: cinza sobre o amarelo e azul sobre o preto.*

encontramos uma das regiões de máximo da figura 34 e começam a aparecer sinais da existência de trajetórias aprisionadas; e outra seção com  $\gamma = 1,8$  (direita), que apresenta uma maior densidade de trajetórias aprisionadas em torno de ilhas de regularidade.

O abrupto surgimento das trajetórias aprisionadas, aproximadamente em  $\gamma \sim 2,7$ , pode ser melhor entendido através das seções de Poincaré, nas figuras 36-37 para  $\gamma = 2,6; 2,7; 2,8; 2,9; 3,0; 3,1; 3,2; 3,8; 4,0$ , respectivamente. Percebe-se claramente que a partir de  $\gamma \sim 2,7$  ocorre o nascimento e formação de ilhas de regularidade. Estas ilhas podem ser caracterizadas como verdadeiras armadilhas dinâmicas. Portanto, em torno destas regiões algumas trajetórias caóticas são aprisionadas por um certo tempo. Conseqüentemente, muitas condições iniciais resultam num expoente de Lyapunov de valor mais baixo.

Embora que  $P_\Lambda(\gamma)$  seja determinado somente para trajetórias com  $\Lambda_t(\gamma)$  positivo, ele fornece informações sobre estruturas regulares no espaço de fases através das trajetórias caóticas que são aprisionadas por armadilhas dinâmicas. Tais trajetórias aprisionadas são características de espaços de fases mesclados. Por este motivo, a  $P_\Lambda(\gamma)$  constitui uma importante ferramenta na descrição da dinâmica dos espaços de fases mesclados.

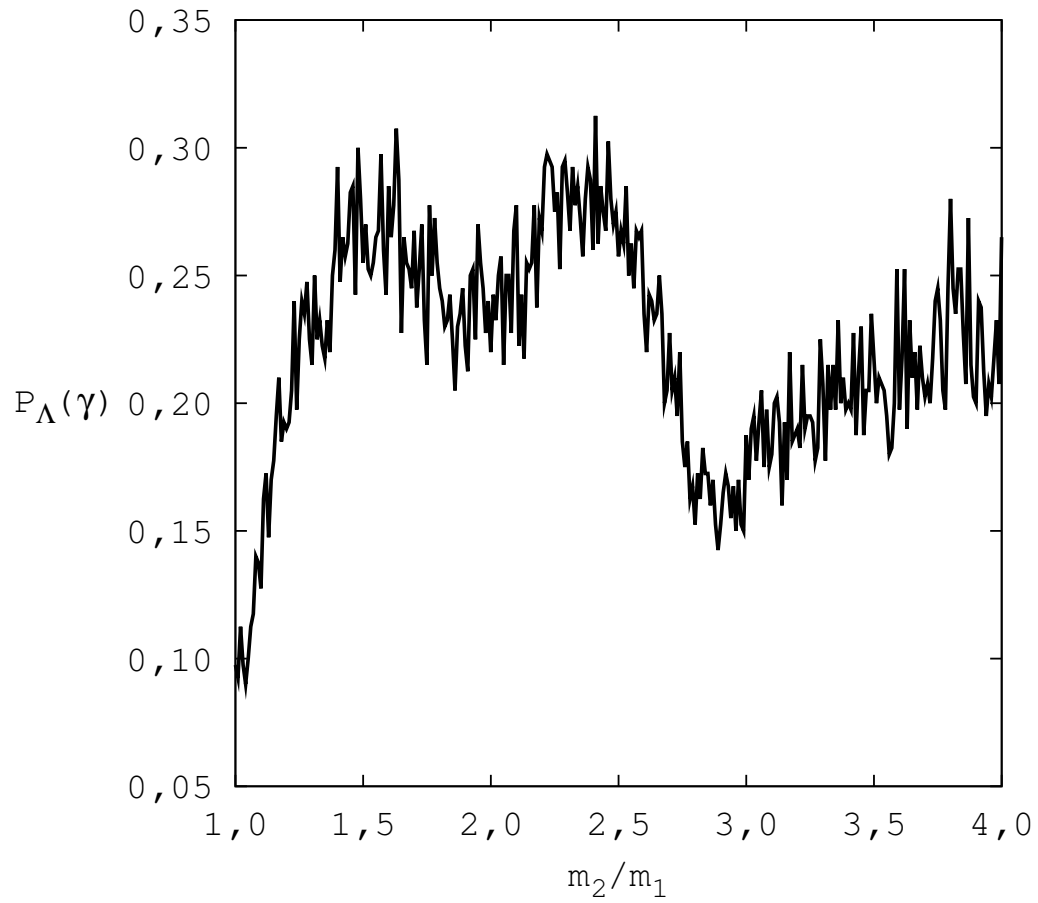


Figura 34: Distribuição normalizada  $P_{\Lambda}(\gamma)$  do expoente de Lyapunov de maior probabilidade de ocorrência  $\Lambda_t^p$ , extraída da figura 33.

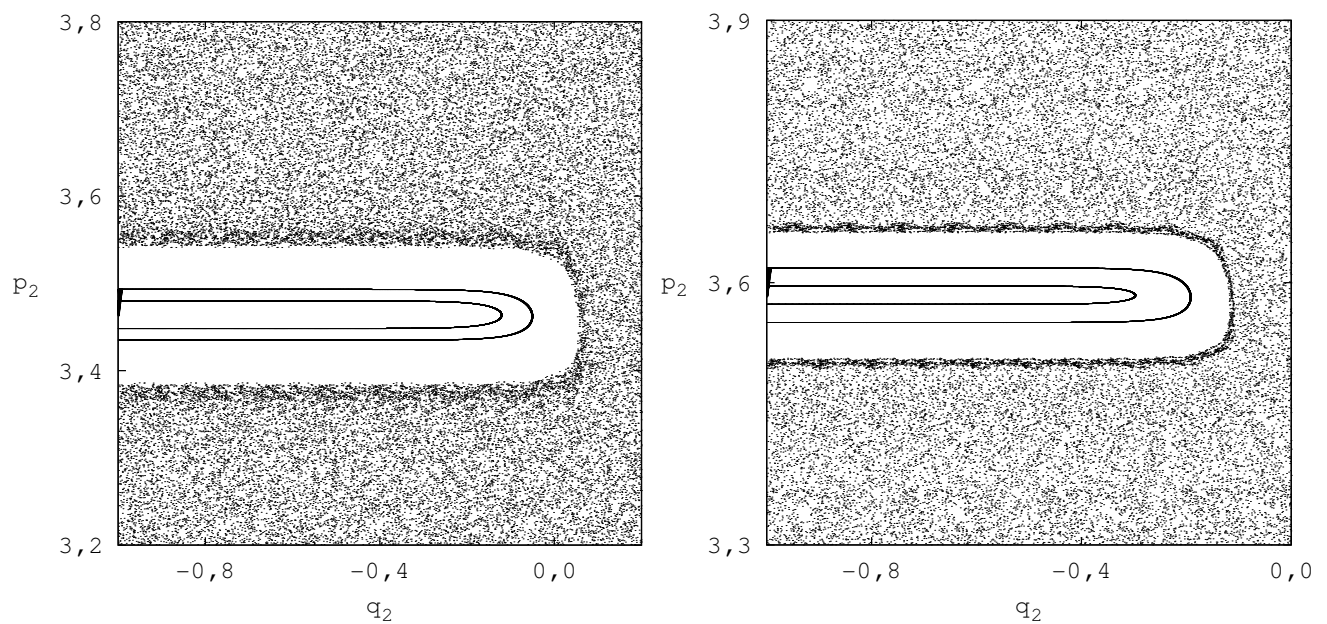


Figura 35: Seções de Poincaré para  $\gamma = 1,5$  (esquerda) e  $\gamma = 1,8$  (direita).



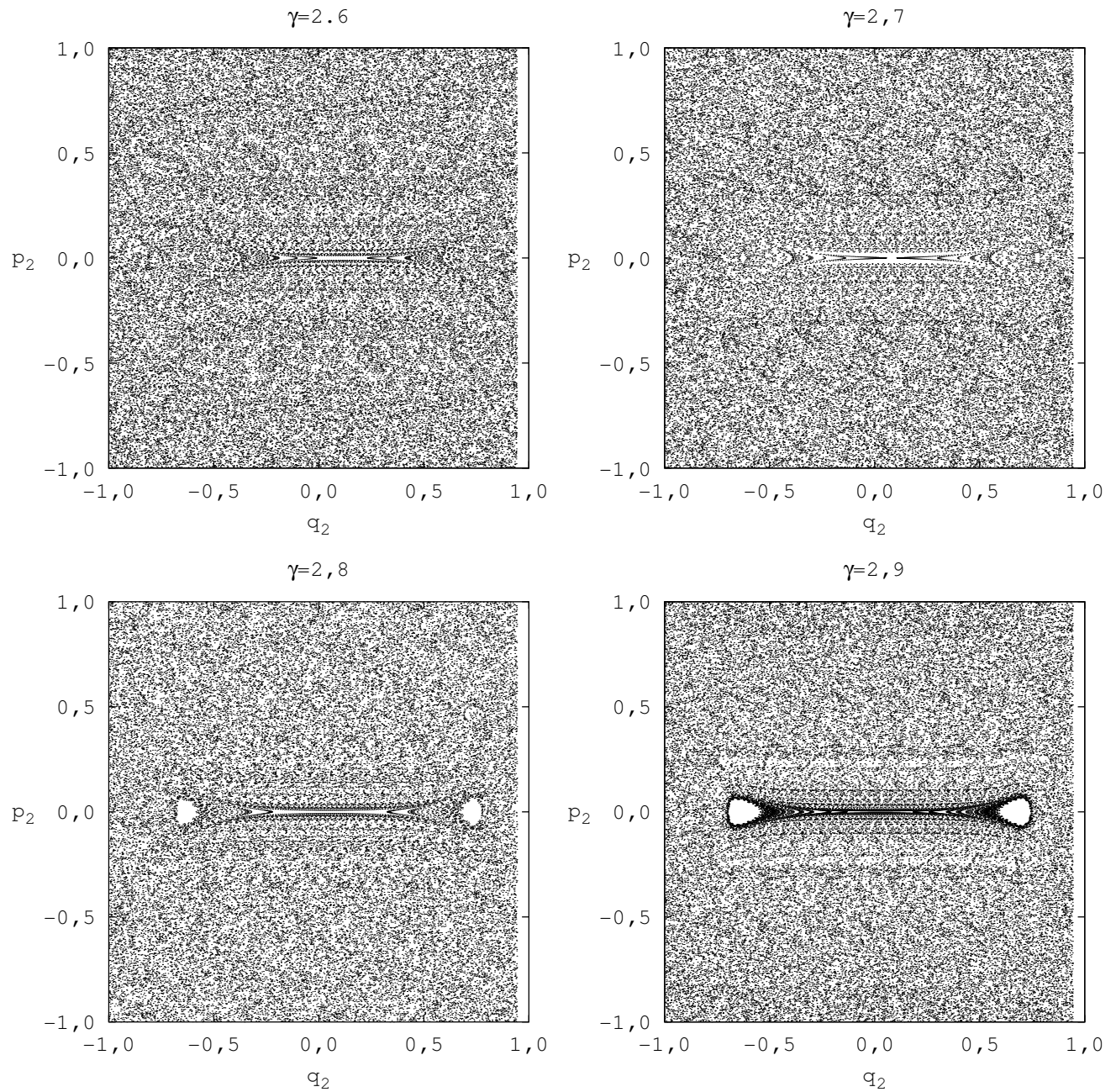


Figura 36: Seções de Poincaré para  $\gamma = 2,6; 2,7; 2,8; 2,9$ . Foram utilizadas 150 condições iniciais. Em  $\gamma \sim 2,7$  ocorre o aparecimento abrupto dos pontos cinzas abaixo da curva principal na figura 33.

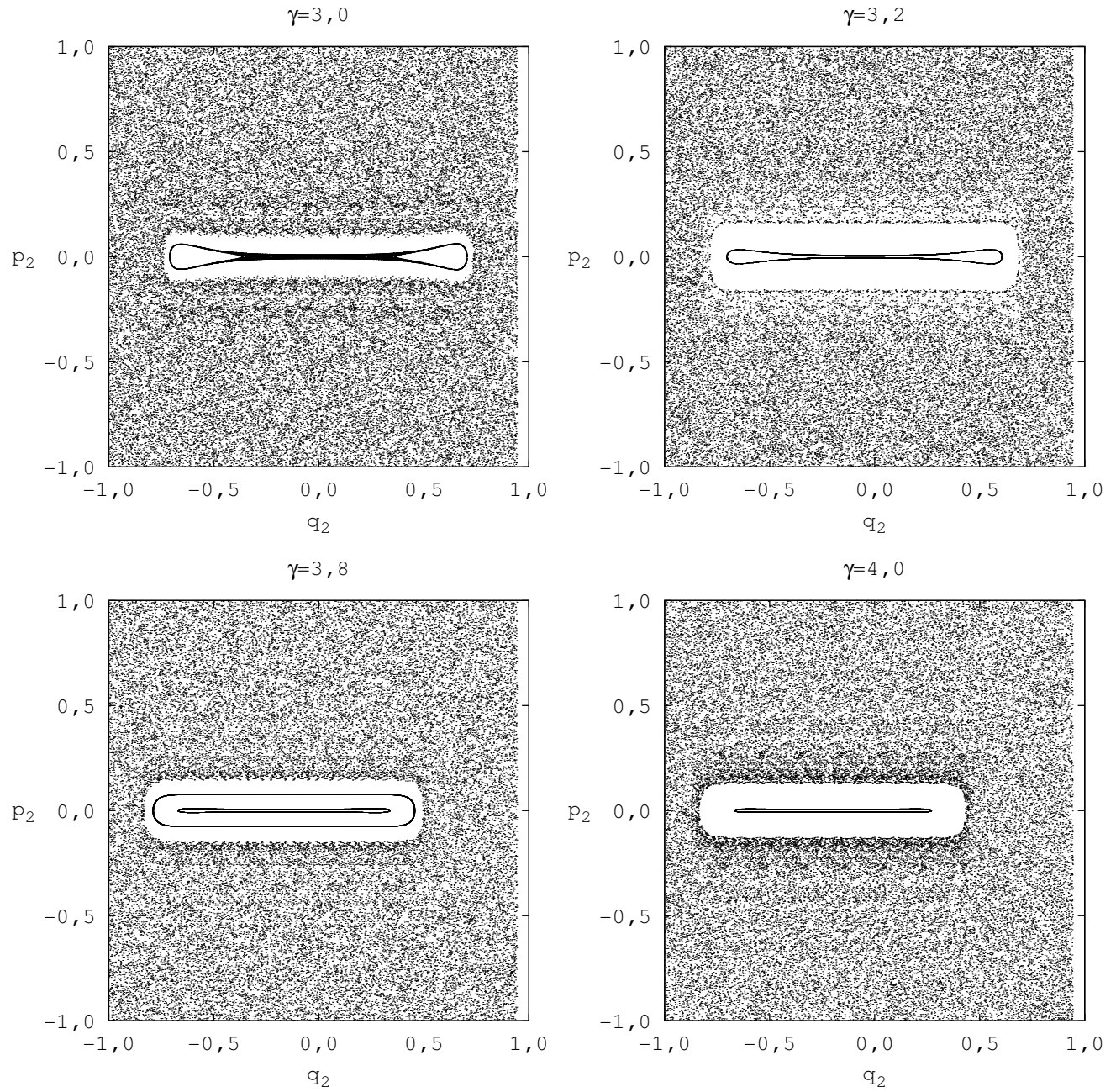


Figura 37: Seções de Poincaré para  $\gamma = 3,0; 3,2; 3,8; 4,0$ , construídas com 150 condições iniciais. Elas mostram a evolução das ilhas de regularidade nascida em  $\gamma \sim 2,7$ .



## 6 *Considerações Finais*

Neste trabalho estudamos o problema de duas partículas clássicas aprisionadas num bilhar unidimensional, interagindo via potencial de Yukawa, como função da razão de massas das partículas  $\gamma$ . O principal objetivo deste trabalho foi caracterizar a dinâmica deste sistema físico. De acordo com a extensão do algoritmo de Benettin *et al.* [28] feita por Dellago *et al.* [29], calculamos analiticamente as matrizes responsáveis pelas transformações necessárias nas colisões da *partícula* com as paredes do bilhar, pelas quais é possível calcular o espectro dos expoentes de Lyapunov. Calculamos numericamente os expoentes de Lyapunov máximos a tempo-finito ( $\Lambda_t$ ) de 400 trajetórias, para cada razão entre as massas das partículas (com passo de variação de  $\Delta\gamma = 0,01$ , no intervalo de  $\gamma = 1,0$  até  $\gamma = 4,0$ ). Obtivemos então, a distribuição dos expoentes de Lyapunov máximos a tempo-finito  $P(\Lambda; t)$ , pela qual encontramos evidências de trajetórias aprisionadas em torno de ilhas de regularidade, características de espaços de fases mesclados. A presença de tais armadilhas dinâmicas no espaço de fases foi comprovada por meio de seções de Poincaré. No Capítulo 2, discutimos três possíveis classes de armadilhas dinâmicas, sendo que devido a complexidade matemática, não foi possível classificar as armadilhas dinâmicas detectadas no espaço de fases de nosso sistema físico. Entretanto, conjecturamos que as ilhas de regularidade que constituem estas armadilhas são do tipo ilhas-hierárquicas. Esta conjectura fundamenta-se na aparente auto-similaridade que tais ilhas de regularidade apresentam.

Através da distribuição dos expoentes de Lyapunov máximos de maior probabilidade de ocorrência  $P_\Lambda(\gamma)$ , constatamos que sinais de movimento integrável e pseudo-integrável remanescentes do problema referente a duas partículas aprisionadas em um bilhar unidimensional e interagindo apenas via colisão frontal, resistem a interações devido a potenciais suaves para determinados valores de  $\gamma$ . De forma geral sabemos que, a quantificação da divergência de trajetórias com condições iniciais muito próximas, determinam se o movimento é caótico ou não. Em geral, o movimento caótico em bilhares é consequência da geometria do bilhar ou da interação entre partículas. Por exemplo, um sistema composto por uma partícula movendo-se entre espalhadores cilíndricos [78] constituindo um sistema de alta-dimensionalidade, similar ao gás de Lorentz com alta-dimensão [79,80], é caótico. Nestes sistemas a dinâmica caótica é gerada pela curvatura convexa dos discos rígidos ou esferas. Em outras palavras, o tempo de atraso entre colisões na superfície curvada da trajetória principal em relação a trajetória satélite é o responsável pela



dinâmica caótica. No sistema estudado nesta dissertação, não há nenhum tipo de curvatura que influencie o movimento caótico, porém existe a interação dada pela força de Yukawa entre as partículas.

Os parâmetros relevantes utilizados neste trabalho foram: o alcance de interação  $\alpha$  e a razão entre as massas das partículas  $\gamma = m_2/m_1$ . Através da distribuição dos expoentes de Lyapunov foi possível demonstrar como o sistema se comporta quando variávamos estes parâmetros. Neste trabalho estudamos dois valores específicos de  $\alpha$ . No primeiro caso, fizemos  $\alpha = 0$ , caracterizando o limite de interações a longas distâncias. No segundo caso temos  $\alpha = 10$ , representando o limite de pequeno alcance de interação. Embora consideramos a interação entre as partículas dada pelo potencial de Yukawa observamos que em ambos os casos, para determinados valores de  $\gamma$ , aparecem sinais de movimento integrável remanescentes do problema estudado por Casati *et al.* [72]; quando  $\alpha = 10$  além dos valores de  $\gamma$ , em que sinais de integrabilidade resistem a interação de Yukawa entre as partículas, em  $\gamma \sim 1,9$  refere-se a um caso de pseudo-integrabilidade no problema de uma partícula aprisionada num bilhar triangular com ângulos racionais [17, 19]. Estas informações (de grande relevância física) foram obtidas na distribuição dos expoentes de Lyapunov máximos a tempo-finito com maior probabilidade de ocorrência  $P_\Lambda(\gamma)$ .

Com os resultados analíticos obtidos para as matrizes no momento das colisões, mostramos que a interação entre as partículas, durante a colisão de uma delas com a parede, e o tempo de atraso colisional são os responsáveis pela dinâmica caótica. No limite de pequeno alcance de interação ( $\alpha = 10$ ), mostramos que quando as duas partículas estão muito próximas de uma das paredes ocorre o que chamamos de *duplas colisões*, que são essenciais para a geração do movimento caótico. Calculamos o valor médio do expoente de Lyapunov máximo a tempo-finito  $\langle \Lambda_t(\gamma) \rangle$ , mostrando que ele decresce suavemente com o incremento da razão de massas e que não fornece informações sobre detalhes da estrutura do espaço de fases. Entretanto, mostramos que este tipo de informação é fornecida pela distribuição da probabilidade do expoente de Lyapunov máximo a tempo-finito  $P(\Lambda_t, \gamma)$ . Esta distribuição revela que a dispersão em torno de  $\langle \Lambda_t(\gamma) \rangle$  aumenta quando as trajetórias aprisionadas estão presentes no espaço de fases. Mostramos que o número de ocorrências do expoente de Lyapunov de maior probabilidade, extraído da distribuição dos expoentes de Lyapunov, também é afetado pela existência de armadilhas dinâmicas no espaço de fases.

Através do corte  $P_\Lambda(\gamma)$ , ao longo do expoente de Lyapunov a tempo-finito de maior probabilidade de ocorrência  $\Lambda_t^p$ , obtivemos uma medida quantitativa da influência do movimento regular e da presença de trajetórias aprisionadas no espaço de fases mesclado. Além disso, a  $P(\Lambda_t, \gamma)$  fornece informações sobre a dinâmica integrável e pseudo-integrável remanescente das colisões rígidas, para determinadas razões de massas das partícula. Mostramos que, para o sistema estudado nesta dissertação,  $P_\Lambda(\gamma)$  diminui quando aparecem estruturas regulares no espaço de fases e as razões

de massas aproximam-se dos casos em que a dinâmica é integrável ( $\gamma = 1, 3$ ) no problema das colisões de partículas rígidas [72]. Observamos que o movimento regular dos casos integráveis para as colisões de partículas rígidas resiste muito a perturbações nas interações suaves, resultando em um movimento regular dos casos de pseudo-integrabilidade. Portanto, a dinâmica sob a influência da interação de Yukawa, embora em princípio caótica, “lembra” a dinâmica regular no sistema sem a interação de Yukawa. Certamente este é um pequeno efeito e por isso esperamos que, em geral, o expoente de Lyapunov mais provável, obtido da distribuição dos expoentes de Lyapunov máximos a tempo-finito forneça uma ferramenta suscetível para provar globalmente detalhes da dinâmica do espaço de fases. Em contraste com as seções de Poincaré, esta ferramenta é facilmente aplicada a sistema de alta dimensionalidade, onde trajetórias aprisionadas podem causar a não-ergodicidade do sistema devido a convergência parcial de uma certa quantidade de trajetórias próximas [81]. Em tais pontos de convergência, uma pequena família de trajetórias próximas inicialmente paralelas levarão a expoentes de Lyapunov que convergem suavemente no tempo.

Podemos citar como idéias de trabalhos futuros: calcular numericamente o espectro dos expoentes de Lyapunov via matrizes apresentadas na seção de resultados analíticos; aplicação do método de distribuição dos expoentes de Lyapunov a tempo-finito em sistemas com muitos graus de liberdade, da mesma forma que fizemos neste trabalho. Estes estudos seriam essencialmente numéricos.

# *Referências*

- 1 POINCARÉ, H. *Les Methodes Nouvelles de la Mécanique Celeste*. [S.l.]: Gauthier-Vilars, 1899.
- 2 BIRKHOFF, G. D. *Acta Mathematica*, v. 50, p. 359, 1927.
- 3 KOLMOGOROV, A. N. *Dokl. Akad. Nauk. SSSR*, v. 98, p. 527, 1954.
- 4 KOLMOGOROV, A. N. *Dokl. Akad. Nauk. SSSR*, v. 119, p. 861, 1958.
- 5 OTT, E. *Chaos in Dynamical Systems*. Maryland: Cambrige University Press, 1993.
- 6 ECKMANN, J. P.; RUELLE, D. *Rev. Mod. Phys.*, v. 57, n. 3, p. 617, 1985.
- 7 OSELEDEC, V. I. *Trans. Moscow Math.*, v. 19, p. 197, 1968.
- 8 ANTENEODO, C. *Phys. Rev. E*, v. 69, p. 016207–1, 2004.
- 9 PRASAD, A.; RAMASWAMY, R. *Phys. Rev. E*, v. 60, p. 2761, 1999.
- 10 GRASSBERGER, C.; BADI, R.; POLITI, A. *J. Stat. Phys.*, v. 51, p. 135, 1988.
- 11 SCHOMERUS, H.; TITOV, M. *Phys. Rev. E*, v. 66, p. 066207, 2002.
- 12 GREBOGI, C.; OTT, E.; YORKE, J. A. *Physica D*, v. 109, p. 81, 1997.
- 13 BEIGIE, D.; LEONARD, A.; WIGGINS, S. *Phys. Rev. Lett.*, v. 70, p. 275, 1993.
- 14 AMITRANO, C.; BERRY, R. S. *Phys. Rev. Lett.*, v. 68, p. 729, 1992.
- 15 SINAI, Y. G. *Funct. Anal. Appl.*, v. 2, p. 61, 1968.
- 16 BUNIMOVICH, L. A. *Funct. Anal. Appl.*, v. 8, p. 254, 1974.
- 17 RICHENS, P. J.; BERRY, M. V. *Physica*, v. 2D, p. 495, 1981.
- 18 SHUDO, A.; SHIMIZU, Y. *Phys. Rev. E*, v. 47, n. 1, p. 54, 1993.
- 19 GORIN, T. *J. Math. Phys.*, v. 34, p. 8281, 2001.
- 20 CASATI, G.; PROSEN, T. *Phys. Rev. Lett.*, v. 83, p. 4729, 1999.
- 21 ULLMO, D.; BARANGER, H. U.; RICHTER, K.; OPEN, F. V.; JALABERT, R. A. *Phys. Rev. Lett.*, v. 80, p. 895, 1998.
- 22 REED, M. A.; KIRK, W. P. *Nanostructure and Fabrication*. [S.l.]: Academic Boston, 1989.
- 23 MERKT, U.; HUSER, J.; WAGNER, M. *Phys. Rev. B*, v. 43, p. 7320, 1991.
- 24 ZASLAVSKY, G. M. *Chaos*, v. 5, n. 04, p. 653, 1995.

- 25 WHITE, R. B.; BENKADDA, S.; KASSIBRAKIS, S.; ZASLAVSKY, G. M. *Chaos*, v. 8, n. 4, p. 757, 1998.
- 26 ZASLAVSKY, G. M. *Chaos*, v. 10, n. 01, p. 135, 2000.
- 27 ZASLAVSKY, G. M. *Physica D*, v. 168, p. 292, 2002.
- 28 BENETTIN, G.; GALGANI, L.; GIORGILLI, A.; STRELCYN, J.-M. *Meccanica*, v. 15, n. 9, p. 09, 1980.
- 29 DELLAGO, C.; POSCH, H. A.; HOOVER, W. G. *Phys. Rev. E*, v. 53, n. 2, p. 1485, 1996.
- 30 GOLDSTEIN, H. *Classical Mechanics*. Massachusetts: Addison-Wesley, 1969.
- 31 LICHTENBERG, A. J.; LIEBERMAN, M. A. *Regular and stochastic motion*. Berkeley: Springer-Verlag, 1983.
- 32 THORNTON, S. T.; MARION, J. B. *Classical Dynamics of Particles and Systems*. Fifth. [S.l.]: Thomson-Brooks/Cole, 1983.
- 33 MOSER, J. *Nach. Akad. Wiss. Gottingen II Math. Phys.*, v. 1, p. 1, 1962.
- 34 ARNOLD, V. I. *Uspekhi Math. Nauk.*, v. 18, p. 13, 1963.
- 35 ARNOLD, V. I.; AVEZ, A. *Ergodic Problems of Classical Mechanics*. New Yorke: Benjamin, 1968.
- 36 BIRKHOFF, G. D. *Acta Math.*, v. 50, p. 359, 1927.
- 37 FERRARA, N. F.; PRADO, C. P. C. do. *Caos, uma Introdução*. São Paulo: Edgard Blücher Ltda, 1994.
- 38 WIGGINS, S. *Introduction to applied nonlinear dynamical systems and chaos*. Califórnia: Springer-Verlag, 1990.
- 39 WOLF, A.; SWIFT, J. B.; SWINNEY, H. L.; VASTANO, J. A. *Physica. D*, v. 16, p. 285, 1985.
- 40 BENETTIN, G.; GALGANI, L.; STRELCYN, J.-M. *Phys. Rev. A*, v. 14, n. 6, p. 2338, 1976.
- 41 BENETTIN, G.; STRELCYN, J.-M. *Phys. Rev. A*, v. 17, n. 2, p. 773, 1978.
- 42 SHIMADA, I.; NAGASHIMA, T. *Prog. Theor. Phys.*, v. 61, p. 1605, 1979.
- 43 YU, J.; WU, G. *Chem. Phys. Lett.*, v. 343, p. 375, 2001.
- 44 ZON, R. van; BEIJEREN, H. van; DELLAGO, C. *Phys. Rev. Lett.*, v. 80, n. 10, p. 2035, 1998.
- 45 ZON, R. van; BEIJEREN, H. van; DORFMAN, J. R. *Phys. Rev. E*, v. 53, n. 2, p. 1485, 1999.
- 46 DORFMAN, J. R. *An Introduction to Chaos in Nonequilibrium Statistical Mechanics*. Maryland: Cambridge, 1999.
- 47 MEISS, J. D.; OTT, E. *Phys. Rev. Lett.*, v. 55, n. 25, p. 2741, 1985.
- 48 BENKADDA, S.; KASSIBRAKIS, S.; WHITE, R. B. *Phys. Rev. E*, v. 55, n. 5, p. 4909, 1995.

- 49 PETROVICHEV, B. A.; ROGALSKY, A. V.; SAGDEEV, R. Z.; ZASLAVSKY, G. M. *Phys. Lett. A*, v. 150, p. 391, 1990.
- 50 ZASLAVSKY, G. M.; STEVENS, D.; WEITZNER, H. *Phys. Rev. E*, v. 48, p. 1683, 1993.
- 51 RAKHLIN, D. A. *Phys. Rev. E*, v. 63, p. 011112–1, 2000.
- 52 POSH, H. A.; HOOVER, W. G. *Molecular Liquids: New Perspectives in Phys. and Chemistry*. [S.l.: s.n.], 1992.
- 53 POSH, H. A.; HOOVER, W. G. *Phys. Rev. A*, v. 38, p. 473, 1988.
- 54 DELLAGO, C.; POSCH, H. A. *Phys. Rev. E*, v. 52, n. 3, p. 2401, 1995.
- 55 DELLAGO, C.; GLATZ, L.; POSCH, H. A. *Phys. Rev. E*, v. 52, n. 5, p. 4817, 1995.
- 56 DELLAGO, C.; POSH, H. A. *Physica A*, v. 240, p. 68, 1997.
- 57 GRASSBERGER, C.; PROCACCIA, I. *Physica D*, v. 13, p. 34, 1984.
- 58 SZEZECH, J. J. D.; LOPES, S. R.; VIANA, R. L. *Phys. Lett. A*, v. 335, p. 394, 2005.
- 59 OKUSHIMA, T. *Phys. Rev. Lett.*, v. 91, p. 254101, 2003.
- 60 GUTKIN, E. *Physica*, v. 19D, p. 311.
- 61 ARNOLD, V. I. *Mathematical Methods of Classical Mechanics*. New Yorke: Springer, 1978.
- 62 GUTKIN, E. *J. Stat. Phys.*, v. 83, n. 7, 1996.
- 63 SINAI, Y. G.; BUNIMOVICH, L. A. *Commun. Math. Phys.*, v. 78, p. 247, 1980.
- 64 MCDONALD, S. W.; KAUFMAN, A. N. *Phys. Rev. Lett.*, v. 42, p. 1189, 1979.
- 65 SIVAN, U. *Phys. Rev. Lett.*, v. 77, p. 1123, 1996.
- 66 VESSEN, M. van; SANTOS, M. C.; CHENG, B. K.; LUZ, M. G. E. da. *Phys. Rev. E*, v. 64, p. 026201, 2001.
- 67 KORNFELD, P.; FOMIN, S. V.; SINAI, Y. G. *Ergodic Theory*. [S.l.]: Springer, 1982.
- 68 REDNER, S. *Am. J. Phys.*, v. 72, p. 1492, 2004.
- 69 GRASSBERGER, P.; NADLER, W.; YANG, L. *Phys. Rev. Lett.*, v. 89, p. 180601–1, 2002.
- 70 CIPRIANI, P.; DENISOV, S.; POLITI, A. *Phys. Rev. Lett.*, v. 94, p. 244301–1, 2005.
- 71 MEZA-MONTES, L.; ULLOA, S. E. *Phys. Rev. E*, v. 55, n. 6, p. 6319, 1997.
- 72 CASATI, G.; FORD, J. J. *Comp. Phys.*, v. 20, p. 97, 1976.
- 73 KOZLOV, V. V.; TRESHCHEV, D. V. *Billiards. A Genetic Introduction to the Dynamics of Systems with Impacts*. [S.l.]: American Mathematical Society, 1991.
- 74 AZEVEDO, A.; LUZ, M. G. E. da. em preparação.
- 75 SINAI, Y. G. *Introduction to Ergodic Theory*. [S.l.]: Princeton University Press, 1976.
- 76 SILVA, L. G. G. V. D. da; AGUIAR, M. A. M. de. *Phys. Rev. B*, v. 66, p. 165309, 2002.

- 
- 77 XAVIER, E. P. S.; SANTOS, M. C.; SILVA, L. G. G. V. D. da; LUZ, M. G. E. da; BEIMS, M. W. *Physica A*, v. 342, p. 377, 2004.
- 78 WIJIN, A. S. *Chaos in Systems with Many Degrees of Freedom*. Tese (Doutorado) — Max Planck Institute for the Physics of Complex Systems, Dresden, 2004.
- 79 BEIJEREN, H. van; DORFMAN, J. R. *Phys. Rev. Lett.*, v. 74, p. 4412, 1995.
- 80 WIJIN, A. S. de; BEIJEREN, H. van. *Phys. Rev. E*, v. 70, p. 036209–1, 2004.
- 81 DONNAY, V. J. *J. Stat. Phys.*, v. 96, p. 1021, 1999.